



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2011-0011665
(43) 공개일자 2011년02월08일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01) H05B 33/20 (2006.01)
C07D 307/78 (2006.01) C07D 307/91 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2010-7027589

(22) 출원일자(국제출원일자) 2009년05월19일
심사청구일자 없음

(85) 번역문제출일자 2010년12월08일

(86) 국제출원번호 PCT/EP2009/056037

(87) 국제공개번호 WO 2009/147011

국제공개일자 2009년12월10일

(30) 우선권주장

08157389.1 2008년06월02일
유럽특허청(EPO)(EP)

(71) 출원인

바스프 에스이

독일 루트비히스펜, 칼-보쉬-스트라쎄 38 (우:
67056)

(72) 발명자

체보타레마 나탈리아

프랑스 에프-68220 아쟁탈 르 바 뒤 드 계랑 33

프레토트 로저

스위스 체하-4054 바젤 제너랄 귀산-슈트라쎄 72
(뒷면에 계속)

(74) 대리인

김진희, 김성기

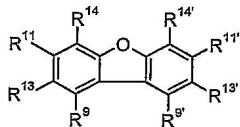
전체 청구항 수 : 총 14 항

(54) 전계 발광 디바이스를 위한 디벤조푸란 중합체

(57) 요약

본 발명은 하기 화학식 I의 반복 구조 단위에 기초한 단독 중합체를 포함하는 전계 발광 물질을 개시한다:

화학식 I



[상기 식 중,

$R^9, R^{9'}, R^{9''}, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{11'}, R^{13'}, R^{14'}$ 는 독립적으로 H 또는 유기 치환기이고;

$R^9, R^{9'}, R^{9''}, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{11'}, R^{13'}, R^{14'}$ 중 하나 이상은 화학식 $-(Sp)_{x10}-[PG']_y$ 의 R^{10} 기이고; 여기서,

Sp는 2가 유기 스페이서이고, PG'는 중합 가능한 기로부터 유도된 기이고, x10은 0 또는 1이고, 치환기 및 스페이서는 제1항에 정의된 바와 같다. 본 발명은 추가로 이러한 종류의 몇몇 신규 중합체 및 이의 제조를 위한 단량체를 개시한다.

일반적으로 인광성 금속 착물 및 형광성 도펀트로부터 선택되는 발광 성분을 더 포함하는 디바이스에서 단독 중합체를 호스트 물질로서 사용하는 것이 유리하다.

(72) 발명자

반 데르 차프 폴 아드리안

프랑스 에프-68220 아쟁탈 레 오 뒤 데 뮤게 1

블렙 안네마리

스위스 체하-4232 퍼렌 슈타이넨빌슈트라쎌 173

블렙 하인츠

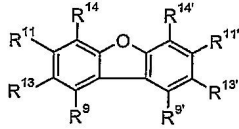
스위스 체하-4232 퍼렌 슈타이넨빌슈트라쎌 173

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 I의 반복 구조 단위에 기초한 단독 중합체를 포함하는 전계 발광 물질:

화학식 I

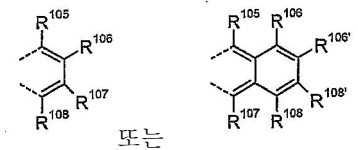


[상기 식 중,

R⁹, R^{9'}, R¹¹, R¹³, R¹⁴, R^{11'}, R^{13'}, R^{14'}은 독립적으로 H, 또는 할로젠; OH; C₁-C₂₄알콕시; E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₂-C₂₄알콕시; C₁-C₂₄알킬; E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₂₄알킬; C₁-C₂₄할로알킬; C₂-C₂₄알케닐; C₂-C₂₄알키닐; C₁-C₂₄알킬티오; C₁-C₂₄아실; C₅-C₂₄아릴; G로 치환된 C₆-C₂₄아릴; C₇-C₂₅아르알킬; C₃-C₁₂시클로알킬; C₁-C₂₄아실옥시; C₅-C₁₀아릴옥시; C₃-C₁₂시클로알킬옥시; COR; CH=NR; CH=N-OH; CH=N-OR; COOR; OCOR; CONHR; NHCOR; CONRR'; CONH-NHR; CONH-NRR'; SR; SO₂R; SO₃R; SO₂NHR; SO₂NRR'; SO₂NH-NHR; SO₂NH-NRR'; S(O)R; S(O)OR; S(O)NHR; S(O)NRR'; S(O)NH-NHR; S(O)NH-NRR'; SiRR'R"; GeRR'R"; PRR'; PORR'; PO(OR)R'; PO(OR)₂; PO(NHR)₂; PO(NRR')₂; CN; NO₂; NHR; NRR'; NH-NHR; NH-NRR'; CONROH로부터 선택되는 유기 치환기이고;

R, R' 및 R"은 독립적으로 C₁-C₁₂알킬, C₁-C₁₂할로알킬, C₅-C₁₀아릴, C₃-C₁₂시클로알킬로부터 선택되고; R은 또한 수소일 수 있거나;

서로에 인접한 R⁹, R¹¹, R¹³, R¹⁴, R^{9'}, R^{11'}, R^{13'} 및 R^{14'} 중 2개의 치환기는 함께 기를 형성하고;



R¹⁰⁵, R¹⁰⁶, R¹⁰⁷, R¹⁰⁸, R^{105'}, R^{106'}, R^{107'} 및 R^{108'}은 서로 독립적으로 H, C₁-C₁₈알킬, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알킬, C₁-C₁₈알콕시, 또는 E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시이고;

D는 -CO-; -COO-; -S-; -SO-; -SO₂-; -O-; -NR²⁵-; -SiR³⁰R³¹-; -POR³²-; -CR²³=CR²⁴-; 또는 -C≡C-이고;

E는 -OR²⁹; -SR²⁹; -NR²⁵R²⁶; -COR²⁸; -COOR²⁷; -CONR²⁵R²⁶; -CN; 또는 할로젠이고;

G는 E, C₁-C₁₈알킬, C₃-C₁₂시클로알킬, D가 개재된 C₂-C₁₈알킬, C₁-C₁₈피플루오로알킬, 또는 E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시이고;

R²³, R²⁴, R²⁵ 및 R²⁶은 서로 독립적으로 H; C₆-C₁₈아릴; C₆-C₁₈아릴알킬; C₃-C₁₂시클로알킬; C₁-C₁₈알킬 및/또는 C₁-C₁₈알콕시로 치환된 C₆-C₁₈아릴 또는 C₆-C₁₈아릴알킬; C₁-C₁₈알킬; 또는 -O-가 개재된 C₂-C₁₈알킬이거나;

R²⁵와 R²⁶은 함께 5원 또는 6원 고리를 형성하고;

R²⁷과 R²⁸은 서로 독립적으로 H; C₆-C₁₈아릴; C₆-C₁₈아릴알킬; C₁-C₁₈알킬 및/또는 C₁-C₁₈알콕시로 치환된 C₆-C₁₈아릴 또는 C₆-C₁₈아릴알킬; C₁-C₁₈알킬; C₃-C₁₂시클로알킬; 또는 -O-가 개재된 C₂-C₁₈알킬이고;

R²⁹는 H; C₆-C₁₈아릴; C₆-C₁₈아릴알킬; C₁-C₁₈알킬 및/또는 C₁-C₁₈알콕시로 치환된 C₆-C₁₈아릴 또는 C₆-C₁₈아릴알킬;

C₁-C₁₈알킬; C₂-C₁₈알킬카르보닐; C₃-C₁₂시클로알킬; 또는 -O가 개재된 C₂-C₁₈알킬 또는 C₂-C₁₈알킬카르보닐이고;

R³⁰ 및 R³¹은 서로 독립적으로 C₁-C₁₈알킬, C₃-C₁₂시클로알킬, C₆-C₁₈아릴, 또는 C₁-C₁₈알킬로 치환된 C₆-C₁₈아릴이고;

R³²는 C₁-C₁₈알킬, C₆-C₁₈아릴, 또는 C₁-C₁₈알킬로 치환된 C₆-C₁₈아릴이고;

R, R' 및 R''은 독립적으로 C₁-C₁₂알킬, C₁-C₁₂할로알킬, C₅-C₁₀아릴, C₃-C₁₂시클로알킬, 바람직하게는 C₁-C₆알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;

Ar은 독립적으로 C₅-C₁₀아릴, 또는 C₁-C₁₈알킬로 치환된 C₅-C₁₀아릴로부터 선택되고;

R⁹, R^{9'}, R¹¹, R¹³, R¹⁴, R^{11'}, R^{13'}, R^{14'}, R¹⁰⁵, R¹⁰⁶, R¹⁰⁷, R¹⁰⁸, R^{105'}, R^{106'}, R^{107'}, R^{108'} 중 하나는 화학식 $-(Sp)_{x10}-[PG]_{x1}$ 의 R¹⁰ 기이고; 여기서,

Sp는 2가 유기 스페이서이고, PG'은 중합 가능한 기로부터 유도된 기이고, x10은 0 또는 1이고;

Sp는 화학식 $(X_3-Ds)_{x11}-X_2$ 로 표시되고; 여기서,

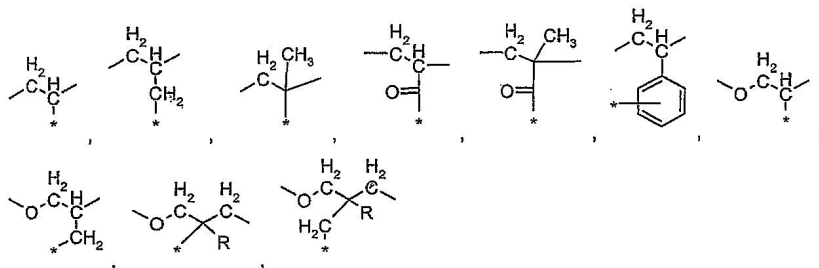
x11은 0 또는 1이고;

X₃, X₂는 독립적으로 O, C₁-C₄알킬렌-O, S, C₁-C₄알킬렌-S, NR₂₂, C₁-C₄알킬렌-NR₂₂, COO, C₁-C₄알킬렌-COO 또는 C₁-C₄알킬렌-OCO, CONR₂₂, C₁-C₄알킬렌-CONR₂₂ 또는 C₁-C₄알킬렌-NR₂₂CO, NR₂₂CONR₂₂, C₁-C₄알킬렌-NR₂₂CONR₂₂, C₁-C₄알킬렌, 또는 직접 결합이고;

R₂₂는 H, C₁-C₁₂알킬, C₃-C₁₂시클로알킬, 페닐이고;

Ds는 C₁-C₂₄알킬렌, 개재된 C₃-C₂₄알킬렌, C₂-C₂₄알케닐렌, C₂-C₂₄알키닐렌, C₆-C₁₀아릴렌이고;

PG'은 바람직하게는 특히 화학식



(여기서, 별표는 Sp 또는 화학식 I의 부분에 대한 이의 결합 위치를 나타내고, R은 상기 정의된 바와 같고, 2개의 추가의 열린 결합은 공중합체 쇄로의 통합을 제공함)의 것으로부터 선택되는 비틀린 산소 고리계(strained oxygen ring system) 또는 에틸렌계 불포화 기로부터 유도된다.]

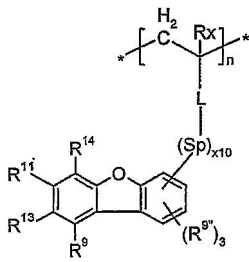
청구항 2

제1항에 있어서, 화학식 I의 반복 구조 단위를 3개 이상, 바람직하게는 5개 이상, 특히 10개 이상 포함하는 단독 중합체를 포함하는 전계 발광 물질.

청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서, 하기 화학식 III의 중합체를 포함하는 전계 발광 물질:

화학식 III



[상기 식 중,

n은 2 내지 10,000 범위이고;

L은 CH₂, CO 또는 직접 결합이고;

R⁹, R¹¹, R¹³, R¹⁴는 H, C₁-C₁₈알킬, 할로젠, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알킬, C₆-C₂₄아릴, G로 치환된 C₆-C₂₄아릴, C₂-C₁₈알케닐, C₂-C₁₈알키닐, C₁-C₁₈알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시, C₇-C₂₅아르알킬, SiRR'R'', GeRR'R'', POAr₂, PAR₂로부터 선택되거나, -CO-R²⁸이고;

각각의 잔기 R^{9'}은 독립적으로 R⁹에 대해 정의된 것으로부터 선택되고;

Rx는 H 또는 메틸이고;

다른 모든 기호는 제1항에 정의된 바와 같다].

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,

n이 5 내지 5,000, 특히 10 내지 1,000 범위이고;

x10이 0이고;

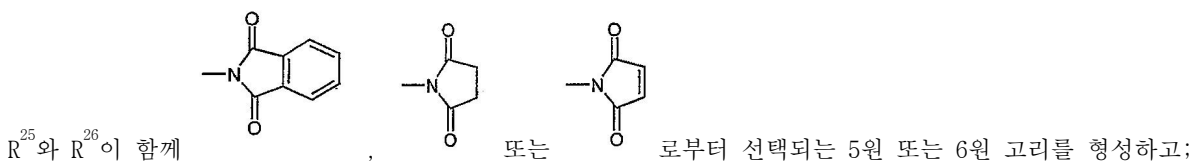
R⁹, R^{9'}, R¹¹, R¹³, R¹⁴가 H, C₁-C₈알킬, 플루오로, E로 치환된 C₁-C₈알킬, D가 개재된 C₂-C₁₈알킬, 페닐, G로 치환된 페닐, C₂-C₈알케닐, C₂-C₈알키닐, C₁-C₈알콕시, E로 치환된 C₁-C₈알콕시, D가 개재된 C₂-C₁₈알콕시, C₇-C₂₅페닐알킬, SiRR'R'', GeRR'R'', POAr₂, PAR₂로부터 선택되거나, -CO-R²⁸이고;

D가 -CO-; -COO-; -S-; -SO-; -SO₂-; -O-; -NR²⁵-; -SiR³⁰R³¹-; -POR³²-이고;

E가 -OR²⁹; -NR²⁵R²⁶; -COR²⁸; -COOR²⁷; -CONR²⁵R²⁶; -CN; 또는 할로젠이고;

G가 E, C₁-C₈알킬, 시클로헥실, D가 개재된 C₂-C₁₈알킬, C₁-C₈퍼플루오로알킬, E로 치환된 C₁-C₁₈알콕시, D가 개재된 C₂-C₁₈알콕시이고;

R²⁵ 및 R²⁶이 서로 독립적으로 H; 페닐; C₇-C₁₂페닐알킬; 시클로헥실; C₁-C₈알킬 또는 C₁-C₈알콕시로 치환된 페닐 또는 C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₁₈알킬; 또는 -O-가 개재된 C₂-C₁₈알킬이거나;



R^{27} 및 R^{28} 이 서로 독립적으로 H; 페닐; C_7-C_{12} 페닐알킬; C_1-C_8 알킬 및/또는 C_1-C_8 알콕시로 치환된 페닐 또는 C_7-C_{12} 페닐알킬; C_1-C_8 알킬; 시클로헥실; 또는 -O-가 개재된 C_2-C_{18} 알킬이고;

R^{29} 가 H; 페닐; C_7-C_{12} 페닐알킬; C_1-C_8 알킬 및/또는 C_1-C_8 알콕시로 치환된 페닐 또는 C_7-C_{12} 페닐알킬; C_1-C_8 알킬; C_2-C_8 알킬카르보닐; 시클로헥실; 또는 -O-가 개재된 C_2-C_{18} 알킬 또는 C_2-C_{18} 알킬카르보닐이고;

R^{30} 및 R^{31} 이 서로 독립적으로 C_1-C_8 알킬, 페닐, 또는 C_1-C_8 알킬로 치환된 페닐이고;

R^{32} 가 C_1-C_8 알킬, 페닐, 또는 C_1-C_8 알킬로 치환된 페닐이고;

R, R' 및 R"이 독립적으로 C_1-C_6 알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;

Ar이 페닐 또는 C_1-C_8 알킬로 치환된 페닐인 화학식 III의 중합체를 포함하는 전계 발광 물질.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

$x10$ 이 0이고;

R^9 , $R^{9'}$, $R^{9''}$, R^{11} , R^{13} , R^{14} , $R^{11'}$, $R^{13'}$, $R^{14'}$ 중 어느 것이 독립적으로 H, C_1-C_8 알킬, 플루오로, E로 치환된 C_1-C_8 알킬, D가 개재된 C_2-C_{18} 알킬, 페닐, G로 치환된 페닐, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 알콕시, E로 치환된 C_1-C_8 알콕시, D가 개재된 C_2-C_{18} 알콕시, C_7-C_{25} 페닐알킬, SiRR'R", GeRR'R", POAr₂, PAr₂로부터 선택되거나, $-CO-R^{28}$ 이고;

D가 $-CO-$; $-COO-$; $-O-$; $-NR^{25}-$; $-SiR^{30}R^{31}-$ 이고;

E가 $-OR^{29}$; $-NR^{25}R^{26}$; $-COR^{28}$; $-COOR^{27}$; $-CONR^{25}R^{26}$; 또는 플루오로이고;

G가 E 또는 C_1-C_8 알킬이고;

R^{25} 및 R^{26} 이 서로 독립적으로 H; C_1-C_8 알킬; 시클로헥실이고;

R^{27} 및 R^{28} 이 서로 독립적으로 H; 페닐; 벤질; C_1-C_8 알킬 및/또는 C_1-C_8 알콕시로 치환된 페닐 또는 벤질; C_1-C_8 알킬이고;

R^{29} 가 H; 페닐; 벤질; C_1-C_8 알킬 및/또는 C_1-C_8 알콕시로 치환된 페닐 또는 벤질; C_1-C_8 알킬; 아세틸; 시클로헥실; 또는 -O-가 개재된 C_2-C_{12} 알킬이고;

R^{30} 및 R^{31} 이 서로 독립적으로 메틸 또는 페닐이고;

R, R' 및 R"이 독립적으로 메틸, 에틸, 페닐로부터 선택되고;

Ar이 페닐인 화학식 I 또는 화학식 III의 구조 단위를 10개 내지 1,000개 포함하는 중합체를 포함하는 전계 발광 물질.

청구항 6

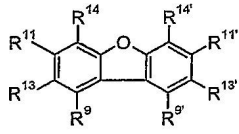
제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서, 중합체 내에서

R^9 , $R^{9'}$, $R^{9''}$, R^{11} , R^{13} , R^{14} , $R^{11'}$, $R^{13'}$, $R^{14'}$ 중 어느 것이 독립적으로 H, C_1-C_8 알킬, SiRR'R"로부터 선택되는 것인 전계 발광 물질.

청구항 7

하기 화학식 II의 화합물의 단독 중합 단계를 포함하는 제조 방법에 의해 제조되는 전계 발광 물질:

화학식 II



[상기 식 중,

$R^9, R^{9'}, R^{11}, R^{11'}, R^{13}, R^{14}, R^{13'}$ 및 $R^{14'}$ 중 하나는 $-(SP)_{x10}-[PG]$ 기인 $R^{10'}$ 이고,

PG는 특히 비닐, 알릴, 1-메틸비닐, (메트)아크릴로일, 비닐페닐, 옥시라닐, 글리시딜, 옥세타닐, 디메틸말레이미딜로부터 선택되는 중합 가능한 기이고;

$x10$ 은 0 또는 1이고;

다른 모든 기호는 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항, 특히 제1항에 정의된 바와 같다].

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 정의된 단독 중합체, 인광성 금속 착물 및 형광성 도펀트로부터 선택되는 발광 성분, 및 임의로 특히 전자 수송체(electron transporter), 정공 수송체(hole transporter), 불활성 중합체, 점도 조절제, 개시제, 유기 염, 및 항산화제 및 UV 흡수제와 같은 안정화제로부터 선택되는 하나 이상의 추가 성분(들)을 포함하는 전계 발광 물질.

청구항 9

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 전계 발광 물질의 층을 포함하는 유기 전자 디바이스, 특히 유기 발광 다이오드 또는 발광 전지.

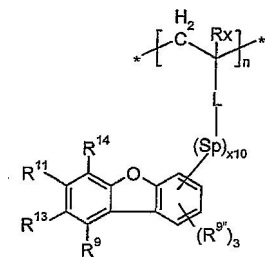
청구항 10

제9항에 있어서, 컴퓨터, 휴대폰, 휴대용 컴퓨터, pda, TV 세트에서의 디스플레이, 프린터, 주방 설비, 광고판, 조명, 예를 들면 버스 및 기차의 안내판 및 행선지 표시판에서의 디스플레이와 같은 정지식 디스플레이 및 이동식 디스플레이로부터 선택되는 디바이스.

청구항 11

하기 화학식 III'의 단독 중합체:

화학식 III'



[상기 식 중,

n 은 5 내지 10,000 범위이고;

잔기 $R^9, R^{9'}, R^{11}, R^{13}, R^{14}$ 중 하나 이상은 C_1-C_{18} 알킬, 할로젠, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알킬, C_6-C_{24} 아릴, G로 치환된 C_6-C_{24} 아릴, C_2-C_{18} 알케닐, C_2-C_{18} 알키닐, C_1-C_{18} 알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-

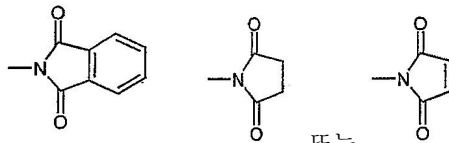
C₁₈알콕시, C₇-C₂₅아르알킬, SiRR'R", GeRR'R", POAr₂, PAr₂, CO-R²⁸; 특히 할로젠, C₂-C₁₈알킬, C₁-C₁₈알콕시, SiRR'R", GeRR'R", POAr₂, PAr₂로부터 선택되고; 나머지 잔기는 또한 수소일 수 있고;

D는 -CO-; -COO-; -S-; -SO-; -SO₂-; -O-; -NR²⁵-; -SiR³⁰R³¹-; -POR³²-이고;

E는 -OR²⁹; -NR²⁵R²⁶; -COR²⁸; -COOR²⁷; -CONR²⁵R²⁶; -CN; 또는 할로젠이고;

G는 E, C₁-C₈알킬, 시클로헥실, D가 개재된 C₂-C₁₈알킬, C₁-C₈피플루오로알킬, E로 치환된 C₁-C₁₈알콕시, D가 개재된 C₂-C₁₈알콕시이고;

R²⁵ 및 R²⁶은 서로 독립적으로 H; 페닐; C₇-C₁₂페닐알킬; 시클로헥실; C₁-C₈알킬 또는 C₁-C₈알콕시로 치환된 페닐 또는 C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₁₈알킬; 또는 -O가 개재된 C₂-C₁₈알킬이거나;



R²⁵와 R²⁶은 함께 , 또는 로부터 선택되는 5원 또는 6원 고리를 형성하고;

R²⁷ 및 R²⁸은 서로 독립적으로 H; 페닐; C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₈알킬 및/또는 C₁-C₈알콕시로 치환된 페닐 또는 C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₈알킬; 시클로헥실; 또는 -O가 개재된 C₂-C₁₈알킬이고;

R²⁹는 H; 페닐; C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₈알킬 및/또는 C₁-C₈알콕시로 치환된 페닐 또는 C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₈알킬; C₂-C₈알킬카르보닐; 시클로헥실; 또는 -O가 개재된 C₂-C₁₈알킬 또는 C₂-C₁₈알킬카르보닐이고;

R³⁰ 및 R³¹은 서로 독립적으로 C₁-C₈알킬, 페닐, 또는 C₁-C₈알킬로 치환된 페닐이고;

R³²는 C₁-C₈알킬, 페닐, 또는 C₁-C₈알킬로 치환된 페닐이고;

R, R' 및 R"은 독립적으로 C₁-C₆알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;

Ar은 페닐 또는 C₁-C₈알킬로 치환된 페닐이고;

L은 CH₂, CO 또는 직접 결합이고; Rx는 H 또는 메틸이고;

x10은 0 또는 1이고, Sp는 0, C₁-C₄알킬렌-O, CH₂-CHOH-CH₂-O, COO, CONR₂, C₁-C₄알킬렌, 또는 CH₂CHOHCH₂이다].

청구항 12

기관 위의 전극 쌍 사이에 제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 따른 중합체 화합물을 포함하는 유기 물질 층을 제공하는 단계를 포함하는 발광 디바이스, 특히 유기 발광 다이오드 또는 발광 전지의 제조 방법.

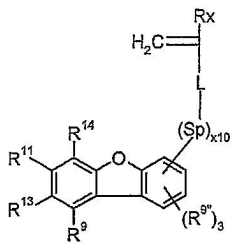
청구항 13

전자 디바이스에서, 특히 유기 발광 다이오드 또는 발광 전지에서 호스트 물질로서 사용되는 제1항 내지 제7항 또는 제11항 중 어느 한 항에 따른 중합체 화합물의 용도.

청구항 14

하기 화학식 V의 화합물:

화학식 V



[상기 식 중,

잔기 R⁹, R^{9'}, R¹¹, R¹³, R¹⁴ 중 하나 이상은 요오도와 같은 할로젠, C₂-C₁₈알킬닐, C₁-C₁₈알콕시, SiRR'R'', GeRR'R'', POAr₂, PAR₂로부터 선택되고; 나머지 잔기는 또한 수소일 수 있고;

R, R' 및 R''은 독립적으로 C₁-C₆알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;

Ar은 페닐 또는 C₁-C₈알킬로 치환된 페닐이고;

L은 CH₂, CO 또는 직접 결합이고; Rx는 H 또는 메틸이고;

x10은 0 또는 1이고, Sp는 0, C₁-C₄알킬렌-0, CH₂-CHOH-CH₂-0, COO, CONR₂, C₁-C₄알킬렌, 또는 CH₂CHOHCH₂이다].

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 몇몇 신규 전계 발광 물질, 이의 제조를 위한 몇몇 신규 물질(특히 중합체), 신규 전계 발광 물질의 제조 방법 및 신규 전계 발광 물질 또는 중합체를 포함하는 전계 발광 디바이스 및 상응하는 용도에 관한 것이다.

배경기술

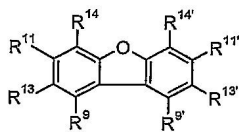
[0002] 몇몇 디벤조푸란 단독 중합체가 특히 광전도 물질로서 GB-601568, US-3294763, FR-1441442 및 GB-1077085에 기재되어 있다. WO 08/029652에는 특히 카바졸 단위 및 디벤조푸란 단위를 조합한 몇몇 올리고머 및 중합체가 개시되어 있다.

[0003] 본 발명에 이르러, 특정 측쇄 디벤조푸란 중합체가 특히 이리듬계 3중항 이미터(TE)의 경우 OLED에서 호스트 물질로서 통상 사용되는 폴리비닐카바졸(PVK)을 대체할 수 있고, 높은 양자 수율 및 효율을 제공한다는 것을 발견하였다.

발명의 내용

[0004] 따라서, 본 발명은 하기 화학식 I의 반복 구조 단위에 기초한 단독 중합체를 포함하는 전계 발광 물질에 관한 것이다:

[0005] 화학식 I



[0006]

[0007] [상기 식 중,

[0008] R⁹, R^{9'}, R^{9''}, R¹¹, R¹³, R¹⁴, R^{11'}, R^{13'}, R^{14'}는 독립적으로 H 또는 유기 치환기이고;_

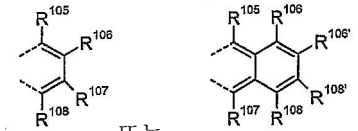
[0009] $R^9, R^{9'}, R^{9''}, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{11'}, R^{13'}, R^{14'}$ 중 하나 이상은 화학식 $-(Sp)_{x10}[PG]_x$ 의 R^{10} 기를 포함하고; 여기서

[0010] Sp는 2가 유기 스페이서이고, PG'는 중합 가능한 기로부터 유도된 기이고, x10은 0 또는 1이다].

[0011] 화학식 I 내 임의의 유기 치환기는, 존재하는 경우, 일반적으로 할로겐; OH; C₁-C₂₄알콕시; E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₂-C₂₄알콕시; C₁-C₂₄알킬; E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₂₄알킬; C₁-C₂₄할로알킬; C₂-C₂₄알케닐; C₂-C₂₄알킬닐; C₁-C₂₄알킬티오; C₁-C₂₄아실; C₅-C₂₄아릴; G로 치환된 C₆-C₂₄아릴; C₁-C₂₀헤테로아릴; G로 치환된 C₂-C₂₀헤테로아릴; C₇-C₂₅아르알킬; C₃-C₁₂시클로알킬; C₁-C₂₄아실옥시; C₅-C₁₀아릴옥시; C₃-C₁₂시클로알킬옥시; COR; CH=NR; CH=N-OH; CH=N-OR; COOR; OCOR; CONHR; NHCOR; CONRR'; CONH-NHR; CONH-NRR'; SR; SO₂R; SO₃R; SO₂NHR; SO₂NRR'; SO₂NH-NHR; SO₂NH-NRR'; S(O)R; S(O)OR; S(O)NHR; S(O)NRR'; S(O)NH-NHR; S(O)NH-NRR'; SiRR'R''; GeRR'R''; PRR'; PORR'; PO(OR)R'; PO(OR)₂; PO(NHR)₂; PO(NRR')₂; CN; NO₂; NHR; NRR'; NH-NHR; NH-NRR; CONROH로부터 선택되고;

[0012] R, R' 및 R''은 독립적으로 C₁-C₁₂알킬, C₁-C₁₂할로알킬, C₅-C₁₀아릴, C₃-C₁₂시클로알킬로부터 선택되고; R은 또한 수소일 수 있거나;

[0013] 서로에 인접한 $R^9, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{9'}, R^{11'}, R^{13'}$ 및 $R^{14'}$ 중 2개의 치환기는 함께 기를 형성하고;



[0014] $R^{105}, R^{106}, R^{107}, R^{108}, R^{105'}, R^{106'}, R^{107'}$ 및 $R^{108'}$ 은 서로 독립적으로 H, C₁-C₁₈알킬, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알킬, C₁-C₁₈알콕시, 또는 E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시이고;

[0015] D는 -CO-; -COO-; -S-; -SO-; -SO₂-; -O-; -NR²⁵-; -SiR^{30,31}-; -POR³²-; -CR²³=CR²⁴-; 또는 -C≡C-이고;

[0016] E는 -OR²⁹; -SR²⁹; -NR^{25,26}; -COR²⁸; -COOR²⁷; -CONR^{25,26}; -CN; 또는 할로겐이고;

[0017] G는 E, C₁-C₁₈알킬, C₃-C₁₂시클로알킬, D가 개재된 C₂-C₁₈알킬, C₁-C₁₈피플루오로알킬, 또는 E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시이고;

[0018] R^{23}, R^{24}, R^{25} 및 R^{26} 은 서로 독립적으로 H; C₆-C₁₈아릴; C₆-C₁₈아릴알킬; C₃-C₁₂시클로알킬; C₁-C₁₈알킬 및/또는 C₁-C₁₈알콕시로 치환된 C₆-C₁₈아릴 또는 C₆-C₁₈아릴알킬; C₁-C₁₈알킬; 또는 -O-가 개재된 C₂-C₁₈알킬이거나;

[0019] R^{25} 와 R^{26} 은 함께 5원 또는 6원 고리를 형성하고;

[0020] R^{27} 과 R^{28} 은 서로 독립적으로 H; C₆-C₁₈아릴; C₆-C₁₈아릴알킬; C₁-C₁₈알킬 및/또는 C₁-C₁₈알콕시로 치환된 C₆-C₁₈아릴 또는 C₆-C₁₈아릴알킬; C₁-C₁₈알킬; C₃-C₁₂시클로알킬; 또는 -O-가 개재된 C₂-C₁₈알킬이고;

[0021] R^{29} 는 H; C₆-C₁₈아릴; C₆-C₁₈아릴알킬; C₁-C₁₈알킬 및/또는 C₁-C₁₈알콕시로 치환된 C₆-C₁₈아릴 또는 C₆-C₁₈아릴알킬; C₁-C₁₈알킬; C₂-C₁₈알킬카르보닐; C₃-C₁₂시클로알킬; 또는 -O-가 개재된 C₂-C₁₈알킬 또는 C₂-C₁₈알킬카르보닐이고;

[0022] R^{30} 및 R^{31} 은 서로 독립적으로 C₁-C₁₈알킬, C₃-C₁₂시클로알킬, C₆-C₁₈아릴, 또는 C₁-C₁₈알킬로 치환된 C₆-C₁₈아릴이고;

[0023] R^{32} 는 C₁-C₁₈알킬, C₆-C₁₈아릴, 또는 C₁-C₁₈알킬로 치환된 C₆-C₁₈아릴이고;

[0024] R, R' 및 R''은 독립적으로 C₁-C₁₂알킬, C₁-C₁₂할로알킬, C₅-C₁₀아릴, C₃-C₁₂시클로알킬, 바람직하게는 C₁-C₆알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;

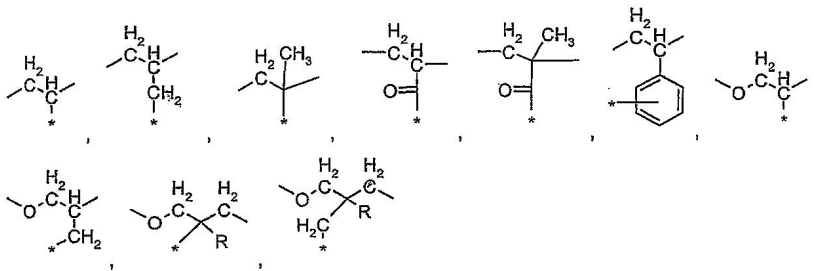
[0025] Ar은 독립적으로 C₅-C₁₀아릴, 또는 C₁-C₁₈알킬로 치환된 C₅-C₁₀아릴로부터 선택되고;

[0026] R⁹, R^{9'}, R¹¹, R¹³, R¹⁴, R^{11'}, R^{13'}, R^{14'}, R¹⁰⁵, R¹⁰⁶, R¹⁰⁷, R¹⁰⁸, R^{105'}, R^{106'}, R^{107'}, R^{108'} 중 하나는 화학식 $-(Sp)_{x10}[PG]_x$ 의 R¹⁰ 기이고; 여기서,

[0027] Sp는 2가 유기 스페이서이고, PG'은 중합 가능한 기로부터 유도된 기이고, x10은 0 또는 1이다.

[0028] R¹⁰ 기 내에 존재할 수 있는 스페이서 단위 Sp는 통상적으로 화학식 $(X_3-Ds)_{x11}-X_2$ 로 표시되고; 여기서, x11은 0 또는 1이고; X₃, X₂는 독립적으로 0, C₁-C₄알킬렌-0, CH₂-CHOH-CH₂-0, S, C₁-C₄알킬렌-S, NR₂₂, C₁-C₄알킬렌-NR₂₂, COO, C₁-C₄알킬렌-COO 또는 C₁-C₄알킬렌-OCO, CONR₂₂, C₁-C₄알킬렌-CONR₂₂ 또는 C₁-C₄알킬렌-NR₂₂CO, NR₂₂CONR₂₂, C₁-C₄알킬렌-NR₂₂CONR₂₂, C₁-C₄알킬렌, CH₂CHOHCH₂, 또는 직접 결합이고; D는 C₁-C₂₄알킬렌, 개재된 C₃-C₂₄알킬렌, C₂-C₂₄알케닐렌, C₂-C₂₄알킬닐렌, C₆-C₁₀아릴렌이다. 바람직한 스페이서 단위 Sp는 X₂(즉, x11이 0인 상기 X₂)(여기서, X₂는 직접 결합, 0, C₁-C₄알킬렌-0, CH₂-CHOH-CH₂-0, COO, CONR₂₂, C₁-C₄알킬렌 또는 CH₂CHOHCH₂임)이다.

[0029] PG'는 중합 가능한 기로부터 유도된 기이고, 이는 Sp(또는 화학식 I 내 이의 앵커 위치)에서 앵커되므로 3가이고, 본 발명의 중합체 쇠 또는 가교결합된 중합체 네트워크로 통합된다. 따라서, PG' 부분의 통상적인 기는 화학식



[0030]

[0031] (여기서, 별표(*)는 Sp 또는 화학식 I의 부분에 대한 이의 결합 위치를 나타내고, R은 상기 정의된 바와 같고, 2개의 추가의 열린 결합은 공중합체 쇠로의 통합을 제공함)의 것을 비롯한 비틀린 산소 고리계(strained oxygen ring system) 또는 에틸렌계 불포화 단량체로부터 유도된다. 이 부분은 본 발명의 최종 중합체로의 측쇄로서 또는 가교결합 부분으로서 원하는 작용성을 도입하기에 특히 적합하다. 상응하는 중합 가능한 기 PG로는 비닐, 알릴, 1-메틸비닐(이소프로페닐), (메트)아크릴로일, 비닐페닐(스티릴), 옥시라닐, 글리시딜, 옥세타닐 등을 들 수 있다. PG' 다른 부분은 상기 추가로 기재된 PG 부분으로부터 유도되는 것, 예를 들면 본 발명의 중합체의 주쇄로 원하는 작용성을 도입하는 것이다.

[0032] 본 발명의 전계 발광 물질에서 사용되는 단독 중합체는 이소택틱(isotactic) 또는 신디오택틱(syndiotactic) 또는, 일반적으로, 어택틱(atactic)일 수 있다.

[0033] 전계 발광 물질은 당해 분야에 공지된 바대로 일반적으로 인광성 금속 착물 및 형광성 도펀트로부터 선택되는 발광 성분을 더 포함한다.

[0034] 본 발명의 중합체는 용액 가공 또는 인쇄(예를 들면, 비가교결합된 중합체의 경우), 전계 발광 디바이스의 장기간 안정성(예를 들면, 마이그레이션/분리/결정화 및 산화/열에 대한 내성) 및 이의 밝기 및 효율과 관련하여 특히 우수한 결과를 나타낸다. "리간드"란 용어는 금속 이온의 배위 구에 부착되는 분자, 이온 또는 원자를 의미하는 것으로 의도된다. "1자리 리간드"는 오직 1개의 배위 자리를 포함하지만, "2자리 리간드"는 2개의 배위 자리를 포함하고, 이들 둘 다 금속 중심에 부착되어 있다. "착물"이란 용어는, 명사로서 사용될 때, 하나 이상의 금속 이온 및 하나 이상의 리간드를 갖는 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. "기" 또는 "부분"이란 용어는 화합물의 일부분, 예컨대 유기 화합물 내의 치환기 또는 착물 내의 리간드를 의미하는 것으로 의도된다. "치환된"이란 용어는 유기 기 또는 화합물 내 수소 원자의 (통상적으로 유기) 치환기에 의한 대체를 의미하는 것으로 의도된다.

[0035] "유기 치환기"란 용어는 유기(즉, C, H 함유) 또는 (헤테로) 작용성 라디칼(예를 들면, 이중 원자 및 임의로 C 또는 H 중 어느 하나로 이루어짐)을 나타내고; 일반적으로, 임의의 유기 치환기는, 존재하는 경우, 화합물의 소량을 구성하고; 유기 치환기에 대한 예로 1개 내지 20개의 탄소 원자 및 임의로 추가의(예를 들면, 1개 내지 10

개의) 이중 원자를 포함하는 유기 라디칼, 통상적으로 1개 내지 5개의 이중 원자를 포함하는 헤테로 작용성 라디칼을 들 수 있다.

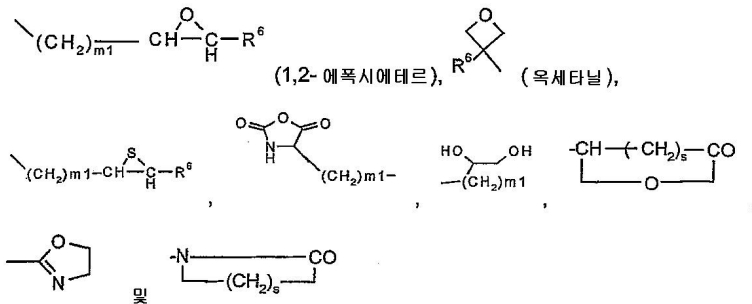
- [0036] 유기 또는 헤테로 작용성 라디칼 내 이중 원자는 일반적으로 그 라디칼을 구성하는 O, S, N, P, Si, B 및 할로젠(즉, F, Cl, Br, I 중 어느 하나; 본 발명의 전계 발광 물질에서는 특히 플루오로)으로부터 선택된다.
- [0037] 유기 치환기는, 존재하는 경우, 대개 할로젠, OH, C₁-C₂₄알콕시, C₁-C₂₄알킬, C₁-C₂₄할로알킬, C₂-C₂₄알케닐, C₂-C₂₄알키닐, C₁-C₂₄알킬티오, C₁-C₂₄아실, C₅-C₁₀아릴, C₁-C₁₀헤테로아릴, C₃-C₁₂시클로알킬, C₁-C₂₄아실옥시, C₅-C₁₀아릴옥시, C₃-C₁₂시클로알킬옥시, 또는 잔기 COR(즉, 알데히드 또는 케토 기), CH=NR, CH=N-OH, CH=N-OR, COOR, OCOR, CONHR, NHCOR, CONRR', CONH-NHR, CONH-NRR', SR, SO₂R, SO₃R, SO₂NHR, SO₂NRR', SO₂NH-NHR, SO₂NH-NRR', S(O)R, S(O)OR, S(O)NHR, S(O)NRR', S(O)NH-NHR, S(O)NH-NRR', 실릴 또는 저마닐 기(SiRR'R", GeRR'R"), PORR', PO(OR)R', PO(OR)₂, PO(NHR)₂, PO(NRR')₂, 시아노(CN), NO₂, NHR, NRR', NH-NHR, NH-NRR', CONROH로부터 선택되고;
- [0038] R, R' 및 R"은 독립적으로 C₁-C₁₂알킬, C₁-C₁₂할로알킬, C₅-C₁₀아릴, C₃-C₁₂시클로알킬, 바람직하게는 C₁-C₆알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;
- [0039] R은 또한 수소일 수 있다. 공통의 치환기는 대개 C₁-C₁₂알킬, 히드록실 기, 머캡토 기, C₁-C₁₂알콕시, C₁-C₁₂알킬티오, 할로젠, 할로-C₁-C₁₂알킬, 시아노 기, 알데히드 기, 케톤 기, 카르복실 기, 에스테르 기, 카바모일 기, 아미노 기, 니트로 기 또는 실릴 기로부터 선택된다.
- [0040] 유기 브릿징 기로서 2개의 이웃하는 잔기, 예컨대 Q¹ 및 Q² 또는 2개의 잔기 R⁴¹(하기 참조)에 의해, 이의 앵커 원자와 함께 형성되는 임의의 축합 고리 또는 고리계는 통상적으로 전체 5개 내지 7개의 고리 원자로 이루어진 탄소 고리식 또는 이중 고리식, 비방향족 또는 바람직하게는 방향족 고리를 형성하고, 대개 하기 기재된 바대로 아릴, 헤테로아릴, 시클로알킬, 또는 치환족 불포화 부분으로부터 선택된다.
- [0041] "할로알킬"이란 용어는 상기 언급된 알킬 기를 할로젠으로 부분 또는 전부 치환하여 제공되는 기를 의미하고, 이 용어는 분지형 또는 비분지형 C₁-C₂₄퍼플루오로알킬, 예를 들면 -CF₃(트리플루오로메틸), -CF₂CF₃, -CF₂CF₂CF₃, -CF(CF₃)₂, -(CF₂)₃CF₃ 및 -C(CF₃)₃ 등을 들 수 있다. "알데히드 기, 케톤 기, 에스테르 기, 카바모일 기 및 아미노 기"로는 C₁-C₂₄알킬 기, C₄-C₁₈시클로알킬 기, C₆-C₃₀아릴 기, C₇-C₂₄아르알킬 기 또는 이중 고리식 기에 의해 치환된 기를 들 수 있고, 여기서 알킬 기, 시클로알킬 기, 아릴 기, 아르알킬 기 및 이중 고리식 기는 비치환 또는 치환될 수 있다. "실릴 기"란 용어는 보다 구체적으로 화학식 -SiR¹⁰⁵R¹⁰⁶R¹⁰⁷의 기를 의미하고, R¹⁰⁵, R¹⁰⁶ 및 R¹⁰⁷은 서로 독립적으로 C₁-C₈알킬 기, 특히 C₁-C₄ 알킬 기, C₆-C₂₄아릴 기 또는 C₇-C₁₂아르알킬 기, 예컨대 트리메틸실릴 기이다.
- [0042] 기 내에 치환기가 1회 이상 존재하는 경우, 이는 각각의 경우에 상이할 수 있다.
- [0043] 알킬은 임의의 비사이클릭 포화 1가 히드록카빌 기를 나타내고; 알케닐은 (알릴에서처럼) 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함하는 상기 기를 의미하고; 유사하게, 알키닐은 (프로파길에서처럼) 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함하는 상기 기를 의미한다. 알케닐 또는 알키닐 기가 하나 이상의 이중 결합을 포함하는 경우, 이 결합은 일반적으로 축적되지 않지만, 교대 순서로 예컨대 -[CH=CH-]_n 또는 -[CH=C(CH₃)-]_n(여기서, n은 예를 들면 2-50 범위일 수 있음) 순서로 배열될 수 있다. 달리 정의되지 않은 경우, 바람직한 알킬은 1-22개의 탄소 원자를 포함하고; 바람직한 알케닐 및 알키닐은 각각 2-22개의 탄소 원자, 특히 3-22개의 탄소 원자를 포함한다.
- [0044] 따라서, 알킬이란 용어는, 어디에서 사용되던, 주로 특히 비개재된, 적절한 경우, 치환된 C₁-C₂₂알킬, 예컨대 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, n-부틸, sec-부틸, 이소부틸, tert-부틸, 2-에틸부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 1-메틸펜틸, 1,3-디메틸부틸, n-헥실, 1-메틸헥실, n-헵틸, 이소헵틸, 1,1,3,3-테트라메틸부틸, 1-메틸헵틸, 3-메틸헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, 1,1,3-트리메틸헥실, 1,1,3,3-테트라메틸펜틸, 노닐, 데실, 운데실, 1-메틸운데실, 도데실, 1,1,3,3,5,5-헥사메틸헥실, 트리데실, 테트라데실, 펜타데실, 헥사데실, 헵타데실, 옥타데실을 포함한다. 알콕시는 알킬-O-이고; 알킬티오는 알킬-S-이다.

- [0045] 따라서, 알케닐이란 용어는, 어디에서 사용되던, 주로 특히 비개재된, 적절한 경우, 치환된 C₂-C₂₂알케닐, 예컨대 비닐, 알릴 등을 포함한다.
- [0046] C₂₋₂₄알키닐을 비롯하여 알키닐은 직쇄 또는 분지쇄이고, C₂₋₈알키닐이 바람직하다. 예를 들면, 에틸닐, 1-프로핀-3-일, 1-부틴-4-일, 1-펜텐-5-일, 2-메틸-3-부틴-2-일, 1,4-펜타디인-3-일, 1,3-펜타디인-5-일, 1-헥신-6-일, 시스-3-메틸-2-펜텐-4-인-1-일, 트랜스-3-메틸-2-펜텐-4-인-1-일, 1,3-헥사디인-5-일, 1-옥틴-8-일, 1-노닌-9-일, 1-데신-10-일 또는 1-테트라코신-24-일.
- [0047] 개재된 것으로 표시될 때, 1개 이상, 특히 2개 이상의 탄소 원자의 임의의 알킬 또는 알킬렌 부분, 또는 다른 부분의 일부인 상기 알킬 또는 알킬렌 부분은 하기 기재된 바대로 비방향족 사이클릭 또는 방향족 사이클릭 (아릴렌 또는 헤테로아릴렌) 부분에 의해 및/또는 바람직하게는 헤테로 작용기, 예컨대 O, S, CO, COO, OCONR₂₂, OCOO, OCONR₂₂, NR₂₂CNR₂₂ 또는 NR₂₂(여기서, R₂₂는 H, C₁-C₁₂알킬, C₃-C₁₂시클로알킬, 페닐임)가 개재될 수 있다. 이것은 상기 스페이서 기 중 하나 이상이 개재될 수 있고, 각각의 경우에 1개의 기는 일반적으로 예를 들면 O-O, S-S, NH-NH 등(존재하지 않음)과 같은 헤테로-헤테로 결합에 의해 1개의 탄소-탄소 결합으로 삽입되고; 개재된 알킬이 추가로 치환되는 경우, 치환기는 일반적으로 이종 원자에 α가 아니다. -O-, -NR₂₂-, -S- 형태의 2개 이상의 개재 기가 1개의 라디칼 내 존재하는 경우, 이들은 대개 동일하다.
- [0048] 아실은 유기 카복실산의 잔기를 나타내고, 이것으로부터 산 OH의 탈취에 의해 정식으로 유도될 수 있다; 예로는 포르밀, 아세틸, 프로피오닐, 벤조일을 들 수 있다. 일반적으로, C₁-C₁₈ 아실은 라디칼 X'-R₂₁[여기서, X'는 CO 또는 SO₂이고, R₂₁은 일반적으로 분자량 300 이하의 1가 지방족 또는 방향족 유기 잔기로부터 선택되고; 예를 들면 R₂₁은 C₁-C₁₈알킬, C₂-C₁₈알케닐, C₅-C₁₀아릴(C₁-C₈알킬 또는 할로젠 또는 C₁-C₈알콕시로 비치환 또는 치환될 수 있음), C₆-C₁₅아릴알킬(방향족 부분에서 C₁-C₈알킬 또는 할로젠 또는 C₁-C₈알콕시로 비치환 또는 치환될 수 있음), C₄-C₁₂시클로알킬로부터 선택될 수 있고, X'가 CO인 경우, R₂₁은 또한 H일 수 있음]을 나타낸다. 아실은 바람직하게는 일반적으로 1개 내지 30개의 탄소 원자의 유기 산 -CO-R₂₁[여기서, R₂₁은 아릴, 알킬, 알케닐, 알키닐, 시클로알킬을 포함하고, 이들 각각은 특히 알킬 잔기에 대해 다른 곳에 기재된 바대로 치환 또는 비치환 및/또는 개재될 수 있거나, 또는 R'는 H(즉, COR'는 포르밀임)일 수 있음]의 지방족 또는 방향족 잔기이다. 결과적으로 아릴, 알킬 등에 기재된 바대로 바람직하다; 더 바람직한 아실 잔기는 치환 또는 비치환 벤조일, 치환 또는 비치환 C₁-C₁₇알카노일 또는 알케노일, 예컨대 아세틸 또는 프로피오닐 또는 부타노일 또는 펜타노일 또는 헥사노일, 치환 또는 비치환 C₅-C₁₂시클로알킬카르보닐, 예컨대 시클로헥실카르보닐이다.
- [0049] 아르알킬은, 주어진 정의 내에서, 일반적으로 치환될 수 있는 C₇-C₂₄아르알킬 라디칼, 바람직하게는 C₇-C₁₅아르알킬 라디칼로부터 선택되고, 예를 들면 벤질, 2-벤질-2-프로필, β-펜에틸, α-메틸벤질, α, α-디메틸벤질, ω-페닐-부틸, ω-페닐-옥틸, ω-페닐-도데실; 또는 페닐 고리에서 1개 내지 3개의 C₁-C₄알킬 기로 치환된 페닐-C₁-C₄알킬, 예를 들면 2-메틸-벤질, 3-메틸벤질, 4-메틸벤질, 2,4-디메틸벤질, 2,6-디메틸벤질 또는 4-tert-부틸벤질 또는 3-메틸-5-(1',1',3',3'-테트라메틸-부틸)-벤질이 있다.
- [0050] 비방향족 사이클릭 (즉, 지환족) 부분으로는 시클로알킬, 지방족 이종 고리식 부분 및 이의 불포화 변형, 예컨대 시클로알케닐을 들 수 있다. 시클로알킬, 예컨대 C₃-C₁₈시클로알킬은 바람직하게는 C₃-C₁₂시클로알킬 또는 1개 내지 3개의 C₁-C₄알킬 기로 치환된 상기 시클로알킬이고, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 메틸시클로펜틸, 디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 메틸시클로헥실, 디메틸시클로헥실, 트리메틸시클로헥실, tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 시클로도데실, 1-아다만틸 또는 2-아다만틸을 들 수 있다. 시클로헥실, 1-아다만틸 및 시클로펜틸이 가장 바람직하다. C₃-C₁₂시클로알킬로는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 시클로운데실, 시클로도데실을 들 수 있고; 이러한 잔기 중에서 C₃-C₆시클로알킬 및 시클로도데실, 특히 시클로헥실이 바람직하다. 존재하는 추가 고리 구조는 일반적으로 5개 내지 7개의 고리 구성원을 포함하고 이들 중에서 일반적으로 O, S, NR₂₂(여기서, R₂₂는 NR₂₂ 기 개재에 대해 상기 설명된 바와 같음)로부터 선택되는 1개 이상, 특히 1~3개의 헤테로 부분을 포함하는 이종 고리식 지방족 고리이고; 예로는 S, O 또는 NR₂₂가 개재된 C₄-C₁₈시클로알킬, 예컨대 피페리딜, 테트라히드로푸라닐, 피페라지닐 및 모르폴리닐을 들 수 있다. 불포화 변형은 2개의 인접 고리 구성

원에서의 수소 원자의 탈취에 의해 이들 사이의 이중 결합의 형성과 함께 이 구조로부터 유도될 수 있다; 이러한 부분에 대한 예로 시클로헥세닐이 있다.

[0051] "아릴"이 어디서(예를 들면, C₅-C₁₀아릴, C₁-C₁₄-헤테로아릴 내) 사용되던, 이는 가장 높은 가능한 수의 이중 결합을 포함하는 방향족 고리 또는 다환 고리계, 예컨대 바람직하게는 페닐, 나프틸, 안트라키닐, 안트라세닐, 페난트레닐 또는 플루오레닐을 의미한다. 아릴이란 용어는 주로 탄화수소 방향족 고리를 포함하고, 예로 주로 페닐, 나프틸, 안트라키닐, 안트라세닐, 페난트레닐, 플루오레닐을 비롯한 C₆-C₁₈아릴을 들 수 있다. C₁-C₁₈헤테로아릴 부분과 같은 헤테로 방향족 고리는, 고리 구조의 일부분으로서, 주로 O, N 및 S로부터 선택되는 하나 이상의 이중 원자를 포함하고; C₄-C₁₈헤테로아릴과 같은 헤테로아릴은 방향족 고리를 형성하는 원자 중에서 특히 N, O, S로부터 선택되는 하나 이상의 이중 원자를 포함하는 아릴 기를 나타내고; 예로는 피리딜, 피리미딜, 피리다질, 피라질, 티에닐, 벤조티에닐, 피릴, 푸릴, 벤조푸릴, 인딜, 카르바졸릴, 벤조트리아졸릴, 티아졸릴, 시놀릴, 이소시놀릴, 트리아지닐, 테트라히드로나프틸, 티에닐, 피라졸릴, 이미다졸릴을 들 수 있다. 예를 들면, 페닐, 나프틸, 피리딜, 테트라히드로나프틸, 푸릴, 티에닐, 피릴, 시놀릴, 이소시놀릴, 안트라키닐, 안트라세닐, 페난트레닐, 피레닐, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조티에닐, 특히 C₆-C₁₀아릴로부터 선택되는 C₆-C₁₀아릴 또는 C₄-C₁₈헤테로아릴이 바람직하고; 페닐, 나프틸이 가장 바람직하다. 임의의 "아릴렌"은 상응하는 2가 "아릴"을 나타낸다.

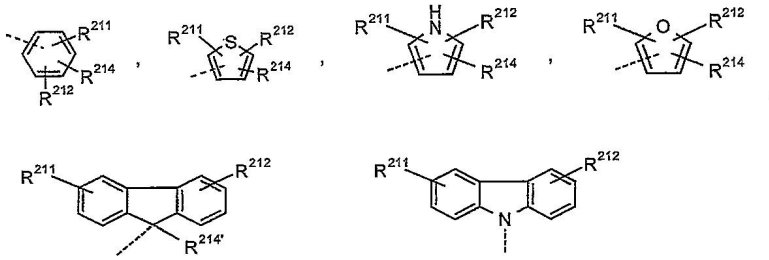
[0052] 예로는 하나 이상의 중합 가능한 기(PG)를 포함하는 단량체, 예컨대 에틸렌계 불포화 부분 또는 비틀린 고리계를 들 수 있다. PG는 대개 -C(R⁴⁴)=CH₂, -NHC(O)-C(R⁴⁵)=CH₂, -OCH₂CH₂OC(O)-C(R⁴⁵)=CH₂, -OC(O)-C(R⁴⁵)=CH₂, -C(O)-C(R⁴⁶)=CH₂, -C≡C-, -C≡CR⁴⁶, -N≡C-, -O-CH(CH₂CH₂CH=CH₂)₂; C₅-C₈시클로알케닐, 바이시클로알케닐(5개 내지 30개의 탄소 원자를 갖는 치환 또는 비치환 바이시클로알케닐 기),



[0053]
 [0054] [상기 식 중,
 [0055] s는 1 내지 6의 정수이고, m1은 1 내지 6의 정수이고,
 [0056] R⁶은 수소 또는 C₁-C₂₀알킬이고,
 [0057] R⁴⁴은 수소 또는 C₁-C₄알킬 또는 할로젠이고,
 [0058] R⁴⁵은 수소, C₁-C₄알킬 또는 할로젠이고,
 [0059] R⁴⁶은 수소, C₁-C₄알킬 또는 C₆-C₁₂아릴임]로부터 선택되는 중합 가능한 기이거나,

[0060] PG'는 중합 가능한 기 R²¹¹
 R²¹²-AHG

[0061] [상기 식 중,
 [0062] AHG는 임의로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로 방향족 잔기, 예컨대



[0063] , 또는 이고,

[0064] 각 점선은 PG'의 결합 위치를 나타내고,

[0065] R²¹¹ 및 R²¹²는 서로 독립적으로 할로젠, -C=CH, 붕산 또는 붕산 에스테르, -Mg-Hal, -Zn-Hal, -Sn(R²¹³)₃이고, Hal은 할로젠이고, R²¹³은 C₁-C₁₈알킬이고, R²¹⁴ 및 R^{214'}은 서로 독립적으로 H, C₁-C₁₈알킬, D가 개재된 C₁-C₁₈알킬, C₁-C₁₈퍼플루오로알킬, C₁-C₁₈알콕시, D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시, 또는 C₇-C₂₅아르알킬임]로부터 유도된 기이다. 예를 들면, 바람직한 기 PG는 비닐, 알릴, (메트)아크릴로일, 스티릴, 옥세타닐, 옥시라닐, 글리시딜이다. PG가

중합 가능한 일 때, 중합체의 제조에 다음의 방법을 사용할 수 있다:

[0066] 니켈 커플링 반응을 이용하여 디할로 작용성 반응물만을 포함하는 중합 방법을 수행할 수 있다. 이러한 하나의 커플링 반응은 콜론(Colon) 등의 문헌[J. Pol. Sci., Part A, Polymer Chemistry Edition 28 (1990) 367] 및 콜론 등의 문헌[J. Org. Chem. 51 (1986) 2627]에 기재되어 있다. 통상적으로 촉매량의 니켈 염, 실질적 양의 트리페닐포스핀 및 다량의 아연 분진과 함께 극성 비양성자성 용매(예를 들면, 디메틸아세트아미드) 중에 반응을 수행한다. 이 방법의 변형은 이요다(Ioyda) 등의 문헌[Bull. Chem. Soc. Jpn, 63 (1990) 80]에 기재되어 있고, 여기서 가속기(accelerator)로서 유기 가용성 요오드를 사용한다.

[0067] 또 다른 니켈 커플링 반응이 야마모토(Yamamoto)의 문헌[Progress in Polymer Science 17 (1992) 1153]에 개시되어 있고, 디할로 방향족 화합물의 혼합물을 불활성 용매 중의 과량의 니켈(1,5-시클로옥타디엔) 착물로 처리한다. 모든 니켈 커플링 반응은 2 이상의 방향족 디할라이드의 반응물 혼합물에 적용될 때 실질적으로 불규칙 중합체를 생성시킨다. 중합 반응 혼합물로의 소량 물의 첨가에 의해 이러한 중합 반응을 종결시킬 수 있고, 이는 말단 할로젠 기를 수소 기로 대체할 것이다. 대안적으로, 이 반응에서 쇠 종결자로서 1작용성 아릴 할라이드를 사용할 수 있고, 이는 말단 아릴 기를 형성시킬 것이다.

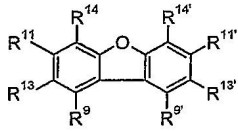
[0068] 일반적으로, 헤크(Heck), 소노가시라(Sonogashira), 쿠마다(Kumada) 반응에서 공지된 것을 비롯하여 관련 기술에 공지된 중합 방법 및 후처리 절차를 본 발명의 중합체에 유사하게 적용할 수 있고; 예를 들면 W007/090773(21 페이지, 12 줄 내지 26 페이지, 17 줄 문단 참조) 또는 W006/097419(41 페이지, 12 줄 내지 44 페이지, 10 줄 및 45 페이지, 15 내지 34 줄 참조)에 유사하게 반응을 수행할 수 있고; 기재된 마지막 2개의 문헌에서의 문단은 본원에 참조문헌으로 포함된다.

[0069] 일반적으로, 본 발명의 중합체의 디벤조푸란 부분은 중합체의 주쇄에 측쇄로서 부착된다. 이러한 구조는, 예를 들면 화합물이 합성에서 몇몇 이점을 발생시키는데, 왜냐하면 이는 그래프팅 반응을 통해 원하는 작용기를 부착시킬 가능성을 열고, 예를 들면 광 개시제의 첨가 하에 또는 부재 하에 적합한 단량체 혼합물에 의해 기관을 코팅하고 방사선(예를 들면, UV, 전자 빔 등) 및/또는 온도에의 노출에 의해 혼합물을 중합하여 원하는 중합체의 특정 제자리 형성을 단순화하기 때문이다.

[0070] 본 발명의 중합체는 선형 또는 가교결합형일 수 있다. 가교결합된 중합체의 경우, 본 발명의 중합체를 구성하는 단량체의 특정 부분은 일반적으로 2개 이상의 중합 가능한 기를 포함하는 가교결합체(가교결합시키는 제제)이다.

[0071] 따라서, 본 발명은 하기 화학식 II의 화합물의 단독 중합에 의해 얻을 수 있는 중합체를 포함한다:

[0072] 화학식 II



[0073]

[0074] [상기 식 중,

[0075] $R^9, R^{9'}, R^{11}, R^{11'}, R^{13}, R^{14}, R^{13'}$ 및 R^{14} 중 하나는 $-(Sp)_{x10}-[PG]$ 기인 $R^{10'}$ 이고,

[0076] PG는 특히 비닐, 알릴, 1-메틸비닐, (메트)아크릴로일, 비닐페닐, 옥시라닐, 글리시딜, 옥세타닐, 디메틸말레이미딜로부터 선택되는 중합 가능한 기이고;

[0077] $x10$ 은 0 또는 1이고;

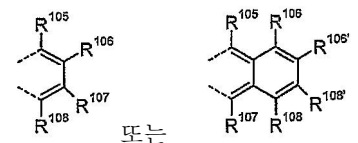
[0078] $R^9, R^{9'}$ 는 추가로 H, C_1-C_{18} 알킬, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알킬, C_1-C_{18} 퍼플루오로알킬, C_6-C_{24} 아릴, G로 치환된 C_6-C_{24} 아릴, C_2-C_{20} 헤테로아릴, G로 치환된 C_2-C_{20} 헤테로아릴, C_2-C_{18} 알케닐, C_2-C_{18} 알키닐, C_1-C_{18} 알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알콕시, C_7-C_{25} 아르알킬, $SiRR'R''$, $GeRR'R''$, $POAr_2$, PAR_2 , $-CO-R^{28}$ 로부터 선택되고;

[0079] R^{11} 및 $R^{11'}$ 는 추가로 수소, 할로젠, C_1-C_{18} 알킬, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알킬, C_1-C_{18} 퍼플루오로알킬, C_2-C_{18} 알케닐, C_2-C_{18} 알키닐, C_1-C_{18} 알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알콕시, CN , $-CO-R^{28}$, $SiRR'R''$, $GeRR'R''$, $POAr_2$, PAR_2 로부터 선택되고;

[0080] $R^{13}, R^{14}, R^{13'}$ 및 $R^{14'}$ 는 추가로 H, 할로젠, C_1-C_{18} 알킬, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알킬, C_1-C_{18} 퍼플루오로알킬, C_6-C_{24} 아릴, G로 치환된 C_6-C_{24} 아릴, C_2-C_{20} 헤테로아릴, G로 치환된 C_2-C_{20} 헤테로아릴, C_2-C_{18} 알케닐, C_2-C_{18} 알키닐, C_1-C_{18} 알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알콕시, C_7-C_{25} 아르알킬, CN , $-CO-R^{28}$ 로부터 선택되고,

[0081] $R^{13}, R^{14}, R^{13'}$ 및 $R^{14'}$ 는 또한 $SiRR'R''$, $GeRR'R''$, $POAr_2$, PAR_2 일 수 있거나;

[0082] 서로에 인접한 $R^9, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{9'}, R^{11'}, R^{13'}$ 및 $R^{14'}$ 중 2개의 치환기는 함께 기를 형성하고,



[0083] 다른 모든 기호는 상기 정의된 바와 같다].

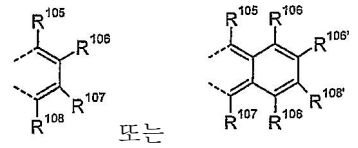
[0084] 본 발명의 바람직한 중합체는 100°C보다 높은 유리 전이 온도를 갖는다.

[0085] 본 발명의 다른 양태는 본 발명의 하나 이상의 중합체 1 내지 99%를 포함하는 중합체 블렌드에 관한 것이다. 블렌드의 나머지 1 내지 99%는 연쇄 중합체, 예컨대 폴리스티렌, 폴리부타디엔, 폴리(메틸 메타크릴레이트) 및 폴리(에틸렌 옥사이드); 단계 중합체, 예컨대 페녹시 수지, 폴리카르보네이트, 폴리아미드, 폴리에스테르, 폴리우레탄 및 폴리이미드; 및 가교결합된 중합체, 예컨대 가교결합된 에폭시 수지, 가교결합된 페놀성 수지, 가교결합된 아크릴레이트 수지 및 가교결합된 우레탄 수지로부터 선택되는 하나 이상의 중합체 물질로 이루어진다. 이러한 중합체의 예는 문헌[Preparative Methods of Polymer Chemistry, W.R. Sorenson and T.W. Campbell, Second Edition, Interscience Publishers (1968)]에서 확인할 수 있다. 또한, 블렌드에서 공액 중합체, 예컨대 폴리(페닐렌 비닐렌), 치환 폴리(페닐렌 비닐렌), 치환 폴리페닐렌 및 폴리티오펜을 사용할 수 있다. 이러한 공액 중합체의 예는 그린햄(Greenham) 및 프렌드(Friend)의 문헌[Solid State Physics, Vol. 49, pp. 1-149

(1995)]에 기재되어 있다.

- [0086] 상기 정의된 단독 중합체를 포함하는 전계 발광 물질은 일반적으로 인광성 금속 착물("3중항 이미터") 및 형광성 도펀트로부터 선택되는 발광 성분을 더 포함한다. 이는 특히 전자 수송체(electron transporter), 정공 수송체(hole transporter), 불활성 중합체, 점도 조절제, 개시제, 유기 염 및 항산화제 및 UV 흡수제와 같은 안정화제로부터 선택되는 하나 이상의 추가 성분(들)을 대개 포함한다.
- [0087] 따라서, 본 발명은 추가로 특히 3중항 이미터(TE), 전자 수송체, 정공 수송체, 불활성 중합체(예컨대, 폴리스티렌과 같은 방향족 단독 중합체 또는 공중합체 또는, 예를 들면 점도 조절제로서 상기 기재된 추가 중합체), 개시제, 유기 염(특히 매트릭스 내 가용성인 경우, 예를 들면 유기 암모늄염)으로부터 선택되는 하나 이상의 추가 성분을 포함하는 전계 발광 물질에 관한 것이다. 따라서, 본 발명의 전계 발광 물질은 대개 1 내지 99%의 본 발명의 하나 이상의 중합체 및 99 내지 1%의 상기 기재된 추가 (보조) 성분 중 하나 이상(대개 이 물질의 나머지를 구성함)을 포함한다.
- [0088] 선형 중합체의 제조를 위한 단량체는 일반적으로 PG의 하나 이상의 추가의 종류(들)를 그래프팅하기 위해 단량체 단위당 오직 한 종류의 중합 가능한 기 및 오직 1개의 PG(즉, 1개의 R¹⁰ 기)를 포함한다. 중합체의 가교결합 및/또는 제자리 제조를 위해, 동일 유형의 2개 이상의 PG 기(즉, 2개 이상의 R¹⁰ 기)를 포함하는 단량체를 사용할 수 있다.
- [0089] 본 발명의 중합체는 바람직하게는 2,000 달톤 이상, 특히 2,000 내지 1,000,000 달톤, 더 바람직하게는 10,000 내지 1,000,000, 가장 바람직하게는 20,000 내지 500,000 달톤의 중량 평균 분자량을 갖는다. 폴리스티렌 표준품 및/또는 광 산란 검출기를 사용하여 겔 투과 크로마토그래피에 따라 분자량을 측정한다.
- [0090] 예를 들면, 축합 및/또는 부가 중합 방법에 의해 선형 또는 가교결합형 중합체를 제조하기 위한 당해 분야에서의 기술에 따라 본 발명의 중합체를 제조할 수 있다. 많은 경우에, 예를 들면 라디칼 생성 및 반응 개시를 위해 화학적 라디칼 개시제, 광 개시제, 화학 방사선 및/또는 열을 사용하여 라디칼 공중합에 의해 PG로서 에틸렌계 불포화 부분을 포함하는 적합한 단량체의 부가 중합에 의해 기본 중합체 네트워크를 형성한다. 예를 들면, 중합체 골격에서 하나 이상의 추가 단량체 및/또는 작용성기를 그래프팅하여 제1 제조 단계에서 형성되는 (공)중합체를 추가로 개질할 수 있다. 반응 조건 및 방법은 예를 들면 W006/097419 또는 W007/090773에 기재된 것을 따를 수 있다. 상기 기재된 바대로, 본 발명의 중합체를 또한 특히 상기 기재된 바대로 가교결합성 단량체의 존재 하에 기관에서 제자리 형성할 수 있다. 예를 들면, 에틸렌계 불포화 기 PG를 포함하는 단량체(단량체의 특정 부분 또는 전부(예를 들면, 1~100%)는 이러한 유형의 2개 또는 3개의 PG 기를 보유함)를 사용하고, 화학 방사선에 의해(예컨대, UV 또는 전자 빔; UV 방사선의 경우 때때로 광 개시제의 존재 하에) 그 단량체를 조사하여 제자리 중합을 효과적으로 수행할 수 있다.
- [0091] 본 발명의 물질에서 존재하는 바람직한 화학식 I의 중합체는
- [0092] R⁹, R^{9'}이 H, C₁-C₁₈알킬, C₃-C₁₂시클로알킬, 할로젠, R¹⁰, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알킬, C₁-C₁₈피플루오로알킬, C₆-C₂₄아릴, G로 치환된 C₆-C₂₄아릴, C₂-C₂₀헤테로아릴, G로 치환된 C₂-C₂₀헤테로아릴, C₂-C₁₈알케닐, C₂-C₁₈알키닐, C₁-C₁₈알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시, C₇-C₂₅아르알킬, SiRR'R", GeRR'R", POAr₂, PAr₂로부터 선택되거나, -CO-R²⁸이고;
- [0093] R¹¹ 및 R^{11'}이 수소, 할로젠, 특히 불소, C₁-C₁₈알킬, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알킬, C₁-C₁₈피플루오로알킬, C₂-C₁₈알케닐, R¹⁰, C₂-C₁₈알키닐, C₁-C₁₈알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시, CN으로부터 선택되거나, -CO-R²⁸, SiRR'R", GeRR'R", POAr₂, PAr₂이고;
- [0094] R¹³, R¹⁴, R^{13'} 및 R^{14'}이 H, 할로젠, 특히 불소, C₁-C₁₈알킬, R¹⁰, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알킬, C₁-C₁₈피플루오로알킬, C₆-C₂₄아릴, G로 치환된 C₆-C₂₄아릴, C₂-C₂₀헤테로아릴, G로 치환된 C₂-C₂₀헤테로아릴, C₂-C₁₈알케닐, C₂-C₁₈알키닐, C₁-C₁₈알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시, C₇-C₂₅아르알킬, CN으로부터 선

택되거나, $-CO-R^{28}$ 이고, R^{13} , R^{14} , $R^{13'}$ 및 $R^{14'}$ 이 또한 $SiRR'R''$, $GeRR'R''$, $POAr_2$, PAr_2 일 수 있거나;



[0095] 서로에 인접한 R^9 , R^{11} , R^{13} , R^{14} , $R^{9'}$, $R^{11'}$, $R^{13'}$ 및 $R^{14'}$ 중 2개의 치환기가 함께 기를 형성하고;

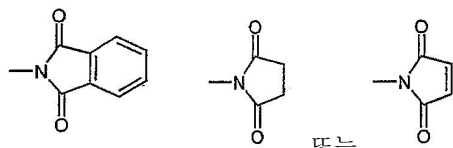
[0096] R^{105} , R^{106} , R^{107} , R^{108} , $R^{105'}$, $R^{106'}$, $R^{107'}$ 및 $R^{108'}$ 이 서로 독립적으로 H, C_1-C_{18} 알킬, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알킬, C_1-C_{18} 알콕시 또는 E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알콕시, 또는 R^{10} 이고;

[0097] D가 $-CO-$; $-COO-$; $-S-$; $-SO-$; $-SO_2-$; $-O-$; $-NR^{25}-$; $-SiR^{30}R^{31}-$; $-POR^{32}-$; $-CR^{23}=CR^{24}-$; 또는 $-C\equiv C-$ 이고;

[0098] E가 $-OR^{29}$; $-SR^{29}$; $-NR^{25}R^{26}$; $-COR^{28}$; $-COOR^{27}$; $-CONR^{25}R^{26}$; $-CN$; 또는 할로겐 이고;

[0099] G가 E, C_1-C_{18} 알킬, C_3-C_{12} 시클로알킬, D가 개재된 C_2-C_{18} 알킬, C_1-C_{18} 피플루오로알킬, 또는 E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C_1-C_{18} 알콕시 이고;

[0100] R^{23} , R^{24} , R^{25} 및 R^{26} 이 서로 독립적으로 H; C_6-C_{18} 아릴; C_6-C_{18} 아릴알킬; C_3-C_{12} 시클로알킬; C_1-C_{18} 알킬 및/또는 C_1-C_{18} 알콕시로 치환된 C_6-C_{18} 아릴 또는 C_6-C_{18} 아릴알킬; C_1-C_{18} 알킬; 또는 $-O-$ 가 개재된 C_2-C_{18} 알킬 이거나;



[0101] R^{25} 와 R^{26} 이 함께 , 또는 로부터 선택되는 5원 또는 6원 고리를 형성하고;

[0102] R^{27} 및 R^{28} 이 서로 독립적으로 H; C_6-C_{18} 아릴; C_6-C_{18} 아릴알킬; C_1-C_{18} 알킬 및/또는 C_1-C_{18} 알콕시로 치환된 C_6-C_{18} 아릴 또는 C_6-C_{18} 아릴알킬; C_1-C_{18} 알킬; C_3-C_{12} 시클로알킬; 또는 $-O-$ 가 개재된 C_2-C_{18} 알킬 이고;

[0103] R^{29} 가 H; C_6-C_{18} 아릴; C_6-C_{18} 아릴알킬; C_1-C_{18} 알킬 및/또는 C_1-C_{18} 알콕시로 치환된 C_6-C_{18} 아릴 또는 C_6-C_{18} 아릴알킬; C_1-C_{18} 알킬; C_2-C_{18} 알킬카르보닐; C_3-C_{12} 시클로알킬; 또는 $-O-$ 가 개재된 C_2-C_{18} 알킬 또는 C_2-C_{18} 알킬카르보닐 이고;

[0104] R^{30} 및 R^{31} 이 서로 독립적으로 C_1-C_{18} 알킬, C_3-C_{12} 시클로알킬, C_6-C_{18} 아릴, 또는 C_1-C_{18} 알킬로 치환된 C_6-C_{18} 아릴 이고;

[0105] R^{32} 가 C_1-C_{18} 알킬, C_6-C_{18} 아릴, 또는 C_1-C_{18} 알킬로 치환된 C_6-C_{18} 아릴 이고;

[0106] R, R' 및 R'' 이 독립적으로 C_1-C_{12} 알킬, C_1-C_{12} 할로알킬, C_5-C_{10} 아릴, C_3-C_{12} 시클로알킬, 바람직하게는 C_1-C_6 알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;

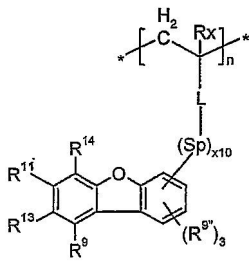
[0107] Ar 이 독립적으로 C_5-C_{10} 아릴, 또는 C_1-C_{18} 알킬로 치환된 C_5-C_{10} 아릴로부터 선택되고;

[0108] 화학식 I 이 1개의 R^{10} 기를 포함하고;

[0109] R^{10} 이 $-(Sp)_{x10}-[PG']<$ 기(여기서, Sp는 2가 유기 스페이서이고, PG'는 중합 가능한 기로부터 유도된 기이고, x10은 0 또는 1임)인 것이다.

[0110] 예를 들면, 본 발명의 전계 발광 물질은 하기 화학식 III의 중합체를 포함할 수 있다:

[0111] 화학식 III



[0112]

[0113] [상기 식 중,

[0114] n은 2 내지 10,000 범위이고;

[0115] L은 CH₂, CO 또는 직접 결합이고;

[0116] R⁹, R¹¹, R¹³, R¹⁴는 H, C₁-C₁₈알킬, 할로젠, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알킬, C₆-C₂₄아릴, G로 치환된 C₆-C₂₄아릴, C₂-C₂₀헤테로아릴, G로 치환된 C₂-C₂₀헤테로아릴, C₂-C₁₈알케닐, C₂-C₁₈알키닐, C₁-C₁₈알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시, C₇-C₂₅아르알킬, SiRR'R'', GeRR'R'', POAr₂, PAr₂로부터 선택되거나, -CO-R²⁸이고;

[0117] 각각의 잔기 R^{9''}은 독립적으로 R⁹에 대해 정의된 것으로부터 선택되고;

[0118] Rx는 H 또는 메틸이고;

[0119] 다른 모든 기호는 상기 정의된 바와 같다].

[0120] 이러한 유형의 바람직한 물질은

[0121] n이 5 내지 5,000, 특히 10 내지 1,000 범위이고;

[0122] x10이 0이고;

[0123] R⁹, R^{9''}, R¹¹, R¹³, R¹⁴가 H, C₁-C₈알킬, 플루오로, E로 치환된 C₁-C₈알킬, D가 개재된 C₂-C₁₈알킬, 페닐, G로 치환된 페닐, C₄-C₁₈헤테로아릴, G로 치환된 C₄-C₁₈헤테로아릴, C₂-C₈알케닐, C₂-C₈알키닐, C₁-C₈알콕시, E로 치환된 C₁-C₈알콕시, D가 개재된 C₂-C₁₈알콕시, C₇-C₂₅페닐알킬, SiRR'R'', GeRR'R'', POAr₂, PAr₂로부터 선택되거나, -CO-R²⁸이고;

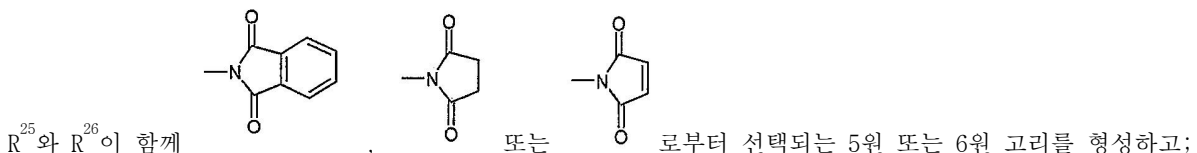
[0124] D가 -CO-; -COO-; -S-; -SO-; -SO₂-; -O-; -NR²⁵-; -SiR³⁰R³¹-; -POR³²-이고;

[0125] E가 -OR²⁹; -NR²⁵R²⁶; -COR²⁸; -COOR²⁷; -CONR²⁵R²⁶; -CN; 또는 할로젠이고;

[0126] G가 E, C₁-C₈알킬, 시클로헥실, D가 개재된 C₂-C₁₈알킬, C₁-C₈퍼플루오로알킬, E로 치환된 C₁-C₁₈알콕시, D가 개재된 C₂-C₁₈알콕시이고;

[0127] R²⁵ 및 R²⁶이 서로 독립적으로 H; 페닐; C₇-C₁₂페닐알킬; 시클로헥실; C₁-C₈알킬 또는 C₁-C₈알콕시로 치환된 페닐 또는 C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₁₈알킬; 또는 -O-가 개재된 C₂-C₁₈알킬이거나;

[0128]



[0129] R^{27} 및 R^{28} 이 서로 독립적으로 H; 페닐; C_7 - C_{12} 페닐알킬; C_1 - C_8 알킬 및/또는 C_1 - C_8 알콕시로 치환된 페닐 또는 C_7 - C_{12} 페닐알킬; C_1 - C_8 알킬; 시클로헥실; 또는 -O가 개재된 C_2 - C_{18} 알킬이고;

[0130] R^{29} 가 H; 페닐; C_7 - C_{12} 페닐알킬; C_1 - C_8 알킬 및/또는 C_1 - C_8 알콕시로 치환된 페닐 또는 C_7 - C_{12} 페닐알킬; C_1 - C_8 알킬; C_2 - C_8 알킬카르보닐; 시클로헥실; 또는 -O가 개재된 C_2 - C_{18} 알킬 또는 C_2 - C_{18} 알킬카르보닐이고;

[0131] R^{30} 및 R^{31} 이 서로 독립적으로 C_1 - C_8 알킬, 페닐, 또는 C_1 - C_8 알킬로 치환된 페닐이고;

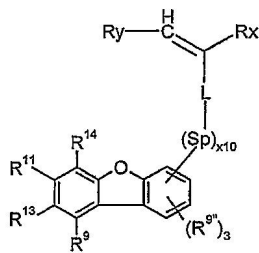
[0132] R^{32} 가 C_1 - C_8 알킬, 페닐, 또는 C_1 - C_8 알킬로 치환된 페닐이고,

[0133] R, R' 및 R"이 독립적으로 C_1 - C_6 알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;

[0134] Ar이 페닐 또는 C_1 - C_8 알킬로 치환된 페닐인 화학식 III의 중합체를 포함한다.

[0135] 화학식 III 내의 별표는 일반적으로 상기 정의된 수소, 알킬(예를 들면, C_1 - C_8), 아릴(예를 들면, 페닐) 또는 아릴알킬(예를 들면, 벤질)로부터 선택되는 공통 말단 기 및/또는 쇠 종결제, 또는 "비반응" 단일 결합 단량체 단위 IV에 의한 중합체 쇠의 진행을 나타낸다:

[0136] 화학식 IV



[0137]

[0138] [상기 식 중,

[0139] Rx는 H 또는 메틸이고, Ry는 중합체 쇠에 대한 결함이거나,

[0140] Ry는 H 또는 메틸이고, Rx는 중합체 쇠에 대한 결함이고,

[0141] 다른 모든 기호는 상기 정의된 바와 같다].

[0142] 일반적으로 본 발명에 따른 바람직한 전계 발광 물질은

[0143] $x10$ 이 0이고;

[0144] R^9 , $R^{9'}$, $R^{9''}$, R^{11} , R^{13} , R^{14} , $R^{11'}$, $R^{13'}$, $R^{14'}$ 중 어느 것이 독립적으로 H, C_1 - C_8 알킬, 플루오로, E로 치환된 C_1 - C_8 알킬, D가 개재된 C_2 - C_{18} 알킬, 페닐, G로 치환된 페닐, C_4 - C_{18} 헤테로아릴, G로 치환된 C_4 - C_{18} 헤테로아릴, C_2 - C_8 알케닐, C_2 - C_8 알키닐, C_1 - C_8 알콕시, E로 치환된 C_1 - C_8 알콕시, D가 개재된 C_2 - C_{18} 알콕시, C_7 - C_{25} 페닐알킬, $SiRR'R''$, $GeRR'R''$, $POAr_2$, PAR_2 로부터 선택되거나, $-CO-R^{28}$ 이고;

[0145] D가 $-CO-$; $-COO-$; $-O-$; $-NR^{25}-$; $-SiR^{30}R^{31}-$ 이고;

[0146] E가 $-OR^{29}$; $-NR^{25}R^{26}$; $-COR^{28}$; $-COOR^{27}$; $-CONR^{25}R^{26}$; 또는 플루오로이고;

[0147] G가 E 또는 C_1 - C_8 알킬이고;

[0148] R^{25} 및 R^{26} 이 서로 독립적으로 H; C_1 - C_8 알킬; 시클로헥실이고;

[0149] R^{27} 및 R^{28} 이 서로 독립적으로 H; 페닐; 벤질; C_1 - C_8 알킬 및/또는 C_1 - C_8 알콕시로 치환된 페닐 또는 벤질; C_1 - C_8 알

킬이고;

[0150] R²⁹가 H; 페닐; 벤질; C₁-C₈알킬 및/또는 C₁-C₈알콕시로 치환된 페닐 또는 벤질; C₁-C₈알킬; 아세틸; 시클로헥실; 또는 -O-가 개재된 C₂-C₁₂알킬이고;

[0151] R³⁰ 및 R³¹이 서로 독립적으로 메틸 또는 페닐이고,

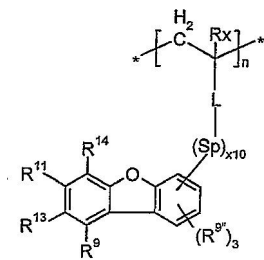
[0152] R, R' 및 R"이 독립적으로 메틸, 에틸, 페닐로부터 선택되고;

[0153] Ar이 페닐이고;

[0154] 특히 R⁹, R^{9'}, R^{9''}, R¹¹, R¹³, R¹⁴, R^{11'}, R^{13'}, R^{14'} 중 어느 것이 독립적으로 H, C₁-C₈알킬, SiRR'R"로부터 선택되는 화학식 I 또는 화학식 III의 구조 단위를 10개 내지 1,000개 포함하는 중합체를 포함한다.

[0155] 본 발명은 추가로 신규 중합체, 즉 하기 화학식 III'의 단독 중합체에 관한 것이다:

[0156] 화학식 III'



[0157]

[0158] [상기 식 중,

[0159] n은 5 내지 10,000 범위이고;

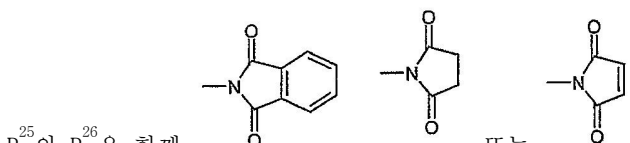
[0160] 잔기 R⁹, R^{9'}, R^{9''}, R¹¹, R¹³, R¹⁴ 중 하나 이상은 C₁-C₁₈알킬, 할로겐, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알킬, C₆-C₂₄아릴, G로 치환된 C₆-C₂₄아릴, C₂-C₂₀헤테로아릴, G로 치환된 C₂-C₂₀헤테로아릴, C₂-C₁₈알케닐, C₂-C₁₈알키닐, C₁-C₁₈알콕시, E로 치환되고/되거나 D가 개재된 C₁-C₁₈알콕시, C₇-C₂₅아르알킬, SiRR'R", GeRR'R", POAr₂, PAR₂, CO-R²⁸; 특히 할로겐, C₂-C₁₈알키닐, C₁-C₁₈알콕시, SiRR'R", GeRR'R", POAr₂, PAR₂로부터 선택되고; 나머지 잔기는 또한 수소일 수 있고;

[0161] D는 -CO-; -COO-; -S-; -SO-; -SO₂-; -O-; -NR²⁵-; -SiR³⁰R³¹-; -POR³²-이고;

[0162] E는 -OR²⁹; -NR²⁵R²⁶; -COR²⁸; -COOR²⁷; -CONR²⁵R²⁶; -CN; 또는 할로겐이고;

[0163] G는 E, C₁-C₈알킬, 시클로헥실, D가 개재된 C₂-C₁₈알킬, C₁-C₈퍼플루오로알킬, E로 치환된 C₁-C₁₈알콕시, D가 개재된 C₂-C₁₈알콕시이고;

[0164] R²⁵ 및 R²⁶은 서로 독립적으로 H; 페닐; C₇-C₁₂페닐알킬; 시클로헥실; C₁-C₈알킬 또는 C₁-C₈알콕시로 치환된 페닐 또는 C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₁₈알킬; 또는 -O-가 개재된 C₂-C₁₈알킬이거나;

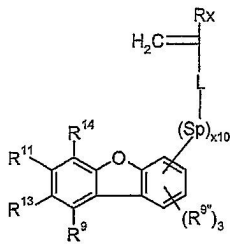


[0165] R²⁵와 R²⁶은 함께 , 또는 로부터 선택되는 5원 또는 6원 고리를 형성하고;

[0166] R²⁷ 및 R²⁸은 서로 독립적으로 H; 페닐; C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₈알킬 및/또는 C₁-C₈알콕시로 치환된 페닐 또는 C₇-C₁₂

페닐알킬; C₁-C₈알킬; 시클로헥실; 또는 -O가 개재된 C₂-C₁₈알킬이고;

- [0167] R²⁹는 H; 페닐; C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₈알킬 및/또는 C₁-C₈알콕시로 치환된 페닐 또는 C₇-C₁₂페닐알킬; C₁-C₈알킬; C₂-C₈알킬카르보닐; 시클로헥실; 또는 -O가 개재된 C₂-C₁₈알킬 또는 C₂-C₁₈알킬카르보닐이고;
- [0168] R³⁰ 및 R³¹은 서로 독립적으로 C₁-C₈알킬, 페닐, 또는 C₁-C₈알킬로 치환된 페닐이고;
- [0169] R³²는 C₁-C₈알킬, 페닐, 또는 C₁-C₈알킬로 치환된 페닐이고;
- [0170] R, R' 및 R"은 독립적으로 C₁-C₆알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;
- [0171] Ar은 페닐 또는 C₁-C₈알킬로 치환된 페닐이고;
- [0172] L은 CH₂, CO 또는 직접 결합이고; Rx는 H 또는 메틸이고;
- [0173] x10은 0 또는 1이고, Sp는 0, C₁-C₄알킬렌-O, CH₂-CHOH-CH₂-O, COO, CONR²², C₁-C₄알킬렌, 또는 CH₂CHOHCH₂이다].
- [0174] 신규 중합체의 바람직한 변형 및 치환 패턴 및 제조 방법은 주로 본 발명의 전계 발광 물질에 사용되는 중합체에 대해 상기 추가로 기재된 바와 같다.
- [0175] 본 발명의 중합체의 제조를 위한 몇몇 중요한 단량체로는 하기 화학식 V인 신규 화합물이 있다:
- [0176] 화학식 V



- [0177]
- [0178] [상기 식 중,
- [0179] 잔기 R⁹, R^{9''}, R¹¹, R¹³, R¹⁴ 중 하나 이상은 요오도와 같은 할로젠, C₂-C₁₈알킬닐, C₁-C₁₈알콕시, SiRR'R'', GeRR'R'', POAr₂, PAR₂로부터 선택되고; 나머지 잔기는 또한 수소일 수 있고;
- [0180] R, R' 및 R"은 독립적으로 C₁-C₆알킬, 페닐, 시클로펜틸, 시클로헥실로부터 선택되고;
- [0181] Ar은 페닐 또는 C₁-C₈알킬로 치환된 페닐이고;
- [0182] L은 CH₂, CO 또는 직접 결합이고; Rx는 H 또는 메틸이고;
- [0183] x10은 0 또는 1이고, Sp는 0, C₁-C₄알킬렌-O, CH₂-CHOH-CH₂-O, COO, CONR²², C₁-C₄알킬렌, 또는 CH₂CHOHCH₂이다].
- [0184] 예를 들면, 화학식 III, 화학식 III', 화학식 IV 및 화학식 V에 존재하는 바대로 각각의 잔기 R^{9''}은 기재된 의미로부터 독립적으로 선택되고, 따라서 이 잔기는 동일하거나 서로 상이할 수 있다.
- [0185] 본 발명의 중합체 화합물을 위한 단량체의 제조는 예를 들면 처음에 인용된 문헌에 기재된 바대로 당해 분야에 공지된 방법을 따를 것이다. 중합 가능한 기의 도입을 R⁹, R^{9''}, R¹¹, R¹³, R¹⁴의 임의의 추가 치환기의 도입에 의한 단량체의 추가 유도체화 전에 완료할 수 있지만; 많은 경우에, R⁹, R^{9''}, R¹¹, R¹³, R¹⁴의 치환기를 함유하는 화합물을 우선 제공하고, 이 생성물을 이후 제2 단계에서 중합 가능한 기 PG를 함유하는 단량체로 전환한다. 또한, 후속 단계에서, 예를 들면 할로젠, 할로알킬, 히드록시 또는 히드록시알킬과 같은 반응성 치환기의 제1 도입 후 치환기를 변형할 수 있다.

- [0186] 용매 사용, 온도, 촉매, 보호 수단, 후처리, 단리 및 정제 절차(이들로 제한되지는 않음)를 비롯한 당해 분야에 공지된 방법에 따라 반응 조건을 적용한다. 추가 상세 사항은 본 발명의 실시예에 설명한다.
- [0187] 또한, 본 발명은 본 발명의 중합체를 포함하는 전자 디바이스 및 이의 제조 방법에 관한 것이다. 전자 디바이스는 2개의 전기 접촉 층 사이에 배치된 하나 이상의 유기 활성 물질을 포함할 수 있고, 이 디바이스의 층 중 하나 이상은 인광성 도펀트(일반적으로 금속 착물, 예컨대 Ir계 3중항 이미터, 또는 형광성 화합물)일 수 있는 발광 도펀트 화합물을 포함한다. 전자 디바이스는 애노드 층(a), 캐소드 층(e) 및 활성 층(c)을 포함할 수 있다. 임의의 정공 주입/수송(전자 차단) 층(b)은 애노드 층(a)에 인접하고, 임의의 전자 주입/수송(정공 차단) 층(d)에 캐소드 층(e)이 인접한다. 층(b) 및 층(d)은 전하 수송 층의 예이다.
- [0188] 활성 층(c)은 바람직하게는 발광 도펀트를 대략 0.1 중량% 이상(대개 1% 초과, 또는 0.1 내지 10%) 포함한다.
- [0189] 상기 디바이스는 애노드 층(a) 또는 캐소드 층(e)에 인접한 지지체 또는 기판을 포함할 수 있다. 가장 흔히, 지지체는 애노드 층(a)에 인접한다. 지지체는 가요성 또는 경성, 유기 또는 무기일 수 있다. 일반적으로, 지지체로서 유리 또는 가요성 유기 필름을 사용한다. 애노드 층(a)은 캐소드 층(e)과 비교하여 정공을 주입하기에 더 효과적인 전극이다. 애노드는 금속, 혼합 금속, 합금, 금속 산화물 또는 혼합 금속 산화물을 함유하는 물질을 포함할 수 있다. 애노드 층(a) 내 적합한 금속 원소로 4족, 5족, 6족 및 8-11족 전이 금속을 들 수 있다. 애노드 층(a)이 광 투과성인 경우, 12족, 13족 및 14족 금속의 혼합 금속 산화물, 예컨대 산화 인듐 주석을 사용할 수 있다. 애노드 층(a)에 대한 물질의 몇몇 비제한적인 구체적인 예로는 산화 인듐 주석("ITO"), 산화 알루미늄 주석, 금, 은, 구리, 니켈 및 셀레늄을 들 수 있다.
- [0190] 화학 또는 물리 증기 증착 방법 또는 스프인 캐스트 방법, 인젝트(inject) 또는 그라비아 인쇄 방법에 의해 애노드 층(a)을 형성할 수 있다. 플라즈마 촉진 화학 증기 증착("PECVD") 또는 금속 유기 화학 증기 증착("MOCVD")으로서 화학 증기 증착을 수행할 수 있다.
- [0191] 물리 증기 증착은 스퍼터링(예를 들면, 이온 빔 스퍼터링), e-빔 증발 및 레지스턴스 증발(resistance evaporation)의 모든 형태를 포함할 수 있다.
- [0192] 물리 증기 증착의 구체적인 형태로 rf 마그네트론 스퍼터링 또는 유도 결합 플라즈마 물리 증기 증착("ICP-PVD")을 들 수 있다. 이러한 증착 기술은 반도체 제조 기술에서 널리 공지되어 있다.
- [0193] 정공 수송 층(b)은 애노드에 인접할 수 있다; 이 층은 정공 주입 층(b1) 및 정공 수송 층(b2)으로 분할될 수 있다. 정공을 수송하는 작은 분자 화합물 및 중합체를 사용할 수 있다.
- [0194] 공통으로 사용되는 정공 수송 분자로는 N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), 1,1-비스[(디-4-톨릴아미노)페닐]시클로헥산(TAPC), N,N'-비스(4-메틸페닐)-N,N'-비스(4-에틸페닐)-[1,1'-(3,3'-디메틸)비페닐]4,4'-디아민(ETPD), 테트라키스-(3-메틸페닐)-N,N,N',N'-2,5-페닐렌디아민(PDA), α-페닐-4-N,N-디페닐아미노스티렌(TP), p-(디에틸아미노)벤즈알데히드디페닐히드라존(DEH), 트리페닐아민(TPA), 비스[4-(N,N-디에틸아미노)-2-메틸페닐](4-메틸페닐)메탄(MPMP), 1-페닐-3-[p-(디에틸아미노)스티릴]-5-[p-(디에틸아미노)페닐]피라졸린(PPR 또는 DEASP), 1,2-트랜스-비(9H-카르바졸-9-일)시클로부탄(DCZB), N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TTB), 4,4'-N,N-디카바졸-비페닐(CBP), N,N-디카르바졸-1,4-디메텐-벤젠(DCB), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐-벤지딘(NPD), 1,3-비스(9-카르바졸릴)벤젠(mCP), 포르피린 화합물, 프탈로시아닌 및 이들의 조합을 들 수 있다. 이와 관련한 추가 물질 및 이용 방법은 US-A-2007-0087219(여기서 [0096]-[0154] 섹션 참조)에 기재되어 있고, 그 문단은 본원에 참조문헌으로 포함된다.
- [0195] 공통으로 사용되는 정공 수송 중합체로는 폴리비닐카바졸, (페닐메틸) 폴리실란, 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)(PEDOT), 트리아릴아민 중합체(예컨대, 폴리[(9,9-디옥틸플루오레닐-2,7-디일)-코-(4,4'-(N-(4-sec-부틸페닐)디페닐아민))][TFB]), 폴리피롤 및 폴리아닐린을 들 수 있다. 상기 기재된 것과 같은 정공 수송 분자를 폴리스티렌 및 폴리카르보네이트와 같은 중합체로 도핑하여 정공 수송 중합체를 얻을 수 있다.
- [0196] 스프인 코팅, 캐스팅 및 인쇄, 예컨대 그라비아 인쇄를 비롯한 임의의 종래 수단을 이용하여 정공 주입/수송 층(b)을 형성할 수 있다. 잉크젯 인쇄, 열 패터닝, 또는 화학 또는 물리 증기 증착에 의해 상기 층을 또한 도포할 수 있다.
- [0197] 일반적으로, 애노드 층(a) 및 정공 주입/수송 층(b)은, 존재하는 경우, 동일한 리소그래피 조작 동안 패터닝한다. 패터닝을 원하는 바대로 변경할 수 있다. 예를 들면, 제1 전기 접촉 층 물질을 도포하기 전에 제1 가요성 복

합 장벽 구조 위에 패턴화 마스크 또는 레지스트를 배치하여 층을 패턴으로 형성할 수 있다. 대안적으로, 층을 전체 층(블랭킷 디포지트(blanket deposit))으로도 불림)으로서 도포하고, 이후 예를 들면 패턴화 레지스트 층 및 습식 화학 또는 건식 에칭 기술을 이용하여 패턴화할 수 있다. 당해 분야에 널리 공지된 패턴화를 위한 다른 방법을 또한 사용할 수 있다. 전자 디바이스를 어레이 내에 배치할 때, 애노드 층(a) 및 정공 주입/수송 층(b)을 통상적으로 실질적으로 동일한 방향으로 확장되는 길이를 갖는 실질적으로 평행인 스트립으로 형성한다. 이 층(b)을 가교결합할 수 있다.

[0198] 활성 층(c)은 발광 도펀트 및 본 발명의 중합체를 포함한다. 선택되는 특정 물질은 특정 용도, 조작 동안 사용되는 전위 또는 다른 인자에 따라 달라질 수 있다. 엑시톤이 발광 메커니즘을 통해 발광 물질로부터 방출되도록 활성 층(c)은 전자, 정공 및/또는 엑시톤을 포획할 수 있는 발광 물질로 도핑된 전자 및/또는 정공을 수송할 수 있는 추가 호스트 물질을 포함할 수 있다. 활성 층(c)은 수송 특성 및 방출 특성이 조합된 단일 물질을 포함할 수 있다. 발광 물질이 도펀트 또는 주요 구성성분이든지 간에, 활성 층은 발광 물질의 발광을 조절하는 도펀트와 같은 다른 물질을 포함할 수 있다. 활성 층(c)은 조합되어 원하는 광 스펙트럼을 방출할 수 있는 복수의 발광 물질을 포함할 수 있다. 발광 물질의 예로 W006000544, W006067074, W007074093 및 이에 인용된 공보에 개시된 인광성 금속 화합물; 및 예를 들면 EP-A-1138746, EP-A-1245659에 개시된 몇몇 형광성 폴리아릴을 들 수 있다. 형광성 발광 물질의 예로 DCM 및 DMQA를 들 수 있다. 추가 호스트 물질의 예로 Alq₃, CBP 및 mCP를 들 수 있다. 발광 물질 및 호스트 물질의 예는 US 6,303,238 B에 개시되어 있고, 이는 그 전문이 참조문헌으로 포함된다.

[0199] 활성 층(c)을 형성하기 위한 방법의 예로 용액 가공에 의한 증착을 들 수 있다. 용액으로부터의 필름 형성 방법의 예로 도포 방법, 예컨대 스핀 코팅, 캐스팅, 마이크로그래비아 코팅, 롤 코팅, 와이어 바 코팅, 딥 코팅, 분무 코팅, 스크린 인쇄, 플렉소그래피, 오프셋 인쇄, 그라비아 인쇄 및 잉크젯 인쇄를 들 수 있다.

[0200] 활성 층(c)을 형성하기 위해 사용되는 조성물로서 본 발명의 하나 이상의 종류의 중합체, 발광 화합물 및 하나 이상의 용매가 포함되고, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 발광 물질, 레올로지 조절제 또는 안정화제와 같은 첨가제를 첨가할 수 있다. 조성물 내 용매의 양은 조성물의 전체 중량의 1 내지 99 중량%, 바람직하게는 60 내지 99 중량%, 더 바람직하게는 80 내지 99 중량%이다.

[0201] 용액 가공 방법에서 사용되는 용매는 특별히 제한되지 않고, 바람직하게는 물질을 용해시키거나 균일하게 분산시킬 수 있는 것이다. 바람직하게는, 그 물질을 용매 중에 용해시키고, 용액을 기관에 증착시키고, 용매를 제거하여 고체 필름이 남게 할 수 있다. 화합물을 용해시키기 위해 임의의 적합한 용매를 사용할 수 있지만, 단 이것은 불활성이고, 적어도 몇몇 물질을 용해시킬 수 있고, 종래 건조 수단(예를 들면, 열, 감압, 기류 등의 인가)에 의해 기관으로부터 제거할 수 있어야 한다. 적합한 유기 용매로는 방향족 또는 지방족 탄화수소, 할로젠화, 예컨대 염화 탄화수소, 에스테르, 에테르, 케톤, 아미드, 예컨대 클로로포름, 디클로로에탄, 테트라히드로푸란, 톨루엔, 크실렌, 에틸 아세테이트, 부틸 아세테이트, 메틸 에틸 케톤, 아세톤, 디메틸 포름아미드, 디클로로벤젠, 클로로벤젠, 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트(PGMEA) 및 알콜 및 이들의 혼합물을 들 수 있지만, 이들로 제한되지는 않는다. 또한 물 및 물 혼화성 용매와의 혼합물이 가능하다. 이 층(c)을 가교결합할 수 있다.

[0202] 임의의 층(d)은 전자 주입/수송, 정공 차단을 촉진하도록 작용할 수 있고, 또한 층 계면에서 켄칭 반응을 막기 위해 완충 층 또는 구속 층으로서 작용할 수 있다. 보다 구체적으로, 층(c) 및 층(e)이 달리 직접 접촉에 있는 경우 층(d)은 전자 이동도를 촉진할 수 있고, 켄칭 반응의 가능성을 줄일 수 있다. 임의의 층(d)에 대한 물질의 예로 금속 킬레이트화 옥시노이드 화합물(예를 들면, 트리스(8-히드록시퀴놀레이토)알루미늄(Alq₃) 등); 페난트롤린계 화합물(예를 들면, 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린("DDPA"), 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린("DPA") 등); 아졸 화합물(예를 들면, 2-(4-비페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸("PBD") 등, 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-(4-t-부틸페닐)-1,2,4-트리아졸("TAZ") 등); 다른 유사 화합물; 또는 임의의 하나 이상의 이들의 조합을 들 수 있다. 이와 관련한 추가 물질 및 이용 방법은 US-A-2006-0210830(여기서 [0076]-[0079] 섹션 참조) 및 US-A-2007-0042220(여기서 [0110]-[0114] 섹션 참조)에 기재되어 있고, 그 문단은 본원에 참조문헌으로 포함된다. 대안적으로, 임의의 층(d)은 무기일 수 있고 BaO, LiF, Li₂O 등을 포함한다. 이 층(d)을 가교결합할 수 있다.

[0203] 스핀 코팅, 캐스팅 및 인쇄, 예컨대 그라비아 인쇄를 비롯한 임의의 종래 수단을 이용하여 전자 주입/수송 층(d)을 형성할 수 있다. 잉크젯 인쇄, 열 패턴화, 또는 화학 또는 물리 증기 증착에 의해 상기 층을 또한 도포할

수 있다.

- [0204] 캐소드 층(e)은 전자 또는 음 전하 운반체를 주입하기에 특히 효과적인 전극이다. 캐소드 층(e)은 제1 전기 접촉 층(이 경우, 애노드 층(a))보다 낮은 일 함수를 갖는 임의의 금속 또는 비금속일 수 있다. 제2 전기 접촉 층을 위한 물질은 1족(예를 들면, Li, Na, K, Rb, C) 알칼리 금속, 2족(알칼리토) 금속, 12족 금속, 희토류, 란탄족(예를 들면, Ce, Sm, Eu 등) 및 악티늄족으로부터 선택될 수 있다. 알루미늄, 인듐, 갈륨, 바륨, 이트륨 및 마그네슘과 같은 물질 및 이들의 조합을 또한 사용할 수 있다. 작동 전압을 낮추기 위해 Li 함유 유기 금속 화합물, LiF 및 Li₂O를 또한 유기 층과 캐소드 층 사이에 증착시킬 수 있다. 캐소드 층(e)을 위한 물질의 구체적인 비제한적인 예로 바륨, 리튬, 세륨, 세슘, 유로퓸, 루비듐, 이트륨, 마그네슘 또는 사마륨을 들 수 있다.
- [0205] 화학 또는 물리 증기 증착 공정에 의해 캐소드 층(e)을 일반적으로 형성한다. 일반적으로, 애노드 층(a) 및 임의의 정공 주입 층(b)과 관련하여 상기 기재된 바대로 캐소드 층을 패터닝할 수 있다. 디바이스를 어레이 내에 배치할 때, 캐소드 층(e)을 실질적으로 평행인 스트립으로 패터닝할 수 있고, 여기서 캐소드 층 스트립의 길이는 실질적으로 동일한 방향으로 확장되고 애노드 층 스트립의 길이에 실질적으로 직각이다.
- [0206] 교차점(평면도 또는 상면도로부터 어레이를 볼 때 애노드 층 스트립이 캐소드 층 스트립을 교차하는 곳)에서 픽셀이라 불리는 전자 원소를 형성한다.
- [0207] 다른 실시양태에서, 유기 전자 디바이스 내에 추가 층(들)이 존재할 수 있다. 예를 들면, 정공 주입 층(b)과 활성 층(c) 사이의 층은 양 전하 수송, 층의 밴드 갭 매칭, 보호 층으로서의 기능 등을 촉진할 수 있다. 유사하게, 전자 주입 층(d)과 캐소드 층(e) 사이의 추가 층은 음 전하 수송, 층의 밴드 갭 매칭, 보호 층으로서의 기능 등을 촉진할 수 있다. 당해 분야에 공지된 층을 일반적으로 사용할 수 있다. 전하 운반체 수송 효율을 증가시키기 위해 몇몇 또는 모든 층을 표면 처리할 수 있다. 디바이스에 높은 디바이스 효율을 제공하는 목표와 제조 비용, 제조 복잡성 또는 가능하게는 다른 인자의 균형을 유지하기 위해 각각의 성분 층을 위한 물질 선택을 결정할 수 있다.
- [0208] 전하 수송 층(b) 및 (d)의 물질은 대개 활성 층(c)의 물질과 동일 형태일 수 있다. 보다 구체적으로, 활성 층(c)이 작은 분자 화합물을 포함하는 경우, 전하 수송 층(b) 및 (d)은, 둘 중 하나 또는 둘 다 존재할 때, 대개 상이한 작은 분자 화합물을 포함한다. 활성 층(c)이 중합체를 포함하는 경우, 전하 수송 층(b) 및 (d)은, 둘 중 하나 또는 둘 다 존재할 때, 대개 중합체를 또한 포함한다. 또한, 활성 층(c)은 작은 분자 화합물을 포함할 수 있고, 임의의 이의 인접 층(예를 들면, 전하 수송 층)은 중합체일 수 있다.
- [0209] 각각의 작용성 층은 하나 이상의 층으로 이루어질 수 있다. 예를 들면, 캐소드 층은 I족 금속 층 및 알루미늄 층을 포함할 수 있다. I족 금속을 활성 층(c)과 가깝게 배치할 수 있고, 알루미늄은 물과 같은 환경 오염으로부터 I족 금속을 보호하는 것을 도울 수 있다.
- [0210] 제한하고자 하는 것은 아니지만, 여러 층은 다음의 두께 범위를 가질 수 있다: 무기 애노드 층(a), 일반적으로 대략 500 nm 이하, 예를 들면 대략 50~200 nm; 임의의 정공 주입 층(b), 일반적으로 대략 100 nm 이하, 예를 들면 대략 50~200 nm; 활성 층(c), 일반적으로 대략 100 nm 이하, 예를 들면 대략 10~80 nm; 임의의 전자 주입 층(d), 일반적으로 대략 100 nm 이하, 예를 들면 대략 10~80 nm; 및 캐소드 층(e), 일반적으로 대략 1,000 nm 이하, 예를 들면 대략 30~500 nm. 애노드 층(a) 또는 캐소드 층(e)이 적어도 일부 광을 수송할 필요가 있을 때, 그 층이 두께는 대략 100 nm를 초과하지 않을 것이다.
- [0211] 디바이스 내 전자-정공 재조합 구역의 위치 및 이에 따른 디바이스의 발광 스펙트럼은 각 층의 상대 두께에 의해 영향을 받을 수 있다. 따라서, 전자 수송 층의 두께는 전자-정공 재조합 구역이 발광 층(즉, 활성 층(c)) 내에 배치되도록 선택해야 한다. 원하는 층 두께 비는 사용되는 물질의 정확한 성질에 따라 달라질 수 있다.
- [0212] 디바이스 내 다른 층을 최적화하여 금속 작동물로 제조된 디바이스의 효율을 추가로 개선할 수 있다. 예를 들면, Ca, Ba, Mg/Ag 또는 LiF/Al과 같은 더 효과적인 캐소드를 사용할 수 있다. 작동 전압 감소를 발생시키거나 또는 양자 효율을 증가시키는 정공 수송 물질 및 성형 기판이 또한 이용가능하다. 다양한 층의 에너지 준위를 조정하고 전계 발광을 촉진하기 위해 추가 층을 또한 첨가할 수 있다.
- [0213] 전자 디바이스의 용도에 따라, 활성 층(c)은 (예컨대, 발광 다이오드 내에서) 신호에 의해 활성화되는 발광 층 또는 복사 에너지에 반응하여 인가된 전위(예컨대, 검출기 또는 볼타 전지)의 존재 또는 부재 하에 신호를 생성시키는 물질의 층일 수 있다. 복사 에너지에 반응할 수 있는 전자 디바이스의 예는 광전도 소자, 포토레지스터, 포토스위치, 포토트랜지스터 및 광전관 및 광전지로부터 선택된다. 당업자는 이의 특정 용도(들)에 적합한 물질

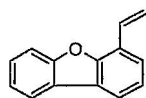
(들)을 선택할 수 있다.

- [0214] 예를 들면, 휴대폰, 텔레비전 및 개인용 컴퓨터 스크린에서 풀 컬러 디스플레이 패널에 전계 발광 디바이스를 사용할 수 있다. 따라서, 본 발명은 또한 본 발명에 따른 유기 발광 다이오드를 포함하는, 컴퓨터, 휴대폰, 휴대용 컴퓨터, pda, TV 세트에서의 디스플레이, 프린터, 주방 설비, 광고판, 조명, 예를 들면 버스 및 기차의 안내판 및 행선지 표시판에서의 디스플레이와 같은 정지식 디스플레이 및 이동식 디스플레이로부터 선택되는 디바이스에 관한 것이다.
- [0215] OLED에서, 캐소드(e) 및 애노드(a) 층으로부터 각각 광활성 층(c)으로 주입되는 전자 및 정공은 활성 층(c) 내에서 음성 및 양성 하전된 폴라론을 형성한다. 이 폴라론은 인가된 전기장의 영향 하에 이동하여, 반대로 하전된 중과 폴라론 엑시톤을 형성하여 이후 복사 재결합한다. 애노드와 캐소드 사이의 충분한 전위차, 일반적으로 대략 20 볼트 미만, 몇몇 경우에 대략 5 볼트 이하를 디바이스에 인가할 수 있다. 실제 전위차는 대형 전자 부품에서 디바이스의 사용에 따라 달라질 것이다. 많은 실시양태에서, 애노드 층(a)은 양 전압에 바이어스되고 캐소드 층(e)은 전자 디바이스의 조작 동안 실질적으로 접지 전위 또는 0 전압에 있다. 배터리 또는 다른 전력원(들)을 회로의 일부로서 전자 디바이스에 전기 접속할 수 있다.
- [0216] 화합물은 효과적이기 위해서 층(b), 층(c) 또는 층(d)에서 사용될 때 고체 매트릭스 희석제(예를 들면, 호스트 전하 수송 물질) 내에 있을 필요는 없다. 층의 전체 중량을 기준으로 하여, 대략 1 중량% 초과와 금속 착물 화합물의 층 및 실질적으로 100% 이하의 본 발명의 중합체를 활성 층(c)으로 사용할 수 있다. 추가 물질이 착물 화합물과 함께 활성 층(c) 내에 존재할 수 있다. 발광 색상을 변경하기 위해, 예를 들면 형광성 염료가 존재할 수 있다.
- [0217] 희석제를 또한 첨가할 수 있다. 희석제는 중합체 물질, 예컨대 폴리(N-비닐 카바졸) 및 폴리실란일 수 있다. 희석제는 또한 작은 분자, 예컨대 4,4'-N,N'-디카바졸 비페닐 또는 3차 방향족 아민일 수 있다. 희석제를 사용할 때, 본 발명의 중합체는 층의 전체 중량을 기준으로 하여 일반적으로 소량, 일반적으로 20중량% 미만, 바람직하게는 10중량% 미만으로 존재한다.
- [0218] 다음의 시험 방법 및 실시예는 단지 예시 목적이 아니고 어떠한 방식으로 어떻게든 본 발명을 제한하는 것으로 해석되지 않는다. 실온(r.t.)은 20~25°C 범위의 온도를 의미하고; 밤새는 12~16 시간 범위의 시간 기간을 의미한다. 백분율은 달리 기재되지 않은 한 중량 기준이다.
- [0219] 실시예 또는 다른 곳에서 사용되는 약어:
- [0220] AIBN: 아조-비스-이소부티로니트릴
- [0221] CIE: 국제조명위원회(Commission Internationale de l'Eclairage)
- [0222] 에 따른 색 정의
- [0223] DMF: 디메틸포름아미드
- [0224] EE: 에틸 아세테이트
- [0225] EtOH: 에탄올
- [0226] HMPA: 헥사메틸포스포르스 트리아미드
- [0227] Ir(ppy)₃: 이리듐 트리스(2-페닐피리딘)
- [0228] (Baldo et al., Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4-6)
- [0229] ITO: 산화 인듐 주석
- [0230] M_w: 중량 평균 분자량
- [0231] M_n: 수 평균 분자량
- [0232] PBD: 2-(p-tert-부틸페닐)-5-비페닐릴-1,3,4-옥사디아졸
- [0233] PDI: 다분산 지수(= [M_w]/[M_n] 비)
- [0234] PEDOT:PSS: 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜) 폴리(스티렌설포네이트)

- [0235] PG: 중합 가능한 기
- [0236] QE: 양자 효율
- [0237] TBME: tert-부틸 메틸 에테르
- [0238] THF: 테트라히드로푸란
- [0239] TPD: N,N'-비페닐-N,N'-디-m-톨릴-벤지딘

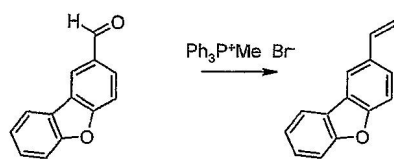
[0240] 실시예 1

[0241] 자석 교반기 및 환류 응축기가 구비된 500 ml 3구 환저 플라스크 내에 수산화칼륨(86%) 16.09 g(0.259 mol)을 넣었다. THF 200 ml 및 디클로로메탄 6.5 ml를 첨가하였다. 이 혼합물을 환류시켰다. 1 시간 후, 이 혼합물을 실온으로 냉각시켰다. 디벤조푸란-4-붕산 8 g(37.74 mmol), 트리페닐포스핀 0.8 g(3.02 mmol), 아세트산 팔라듐 (II) 339 mg(0.7 mmol) 및 메탄올 200 ml의 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 60°C 내부 온도로 가열하였다. 2 시간 후, 이 반응을 종결하고 실온으로 냉각시켰다. 이 혼합물을 H₂O 및 에틸아세테이트로 희석하였다. 유기 상을 물로 2회, 염수로 1회 추출하였다. 유기 상을 황산나트륨으로 건조시키고 용매를 증발시킨다. 미정제 생성물을 칼럼 크로마토그래피(헵탄)에 의해 정제하였다. 4-비닐-디벤조푸란을 42% 수율로 분리시켰다.



- [0242]
- [0243] ¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): 7.94 (d, 1H)
- [0244] 7.84 (d, 1H)
- [0245] 7.61 (d, 1H)
- [0246] 7.50 (m, 2H)
- [0247] 7.36 (m, 2H)
- [0248] 7.12 (dxd 1H)
- [0249] 6.32 (d, 1H)
- [0250] 5.60 (d, 1H)

[0251] 실시예 2

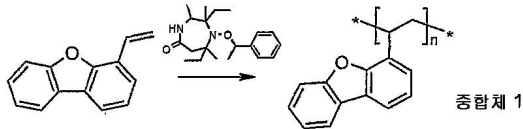


[0252]

[0253] 자석 교반기가 구비된, 500 ml 3구 환저 플라스크 내에 메틸 트리페닐포스포늄 브로마이드 22.7 g(63.7 mmol) 및 건조 THF 200 ml를 넣고, 반응 혼합물을 NaCl/얼음 욕으로 0°C 내부 온도로 냉각시켰다. 내부 온도를 3°C보다 낮게 유지시키면서 헥산 중의 1.6 M 부틸 리튬 용액 41.8 ml(66.9 mmol)를 30 분 내에 첨가하였다. 이 반응 혼합물을 동일 온도에서 45 분 동안 교반한 후, 건조 THF 100 ml 중에 용해된 디벤조푸란-2-카복스알데히드 47.2 mmol를 30 분 내에 첨가하였다. 2 시간 후, 이 반응 혼합물을 실온으로 가온하고 물 500 ml에 첨가하고 에틸아세테이트 500 ml로 2회 추출하였다. 합한 유기 상을 완충액(pH=1) 및 염수의 1:1 혼합물 500 ml로 1회, 염수 30 ml로 1회 세척하고 황산마그네슘으로 건조시키고 여과시키고 증발시켰다. 미정제 생성물을 디클로로메탄 중에 용해시키고 실리카 100 g을 첨가하고 용매를 증발시켰다. 소결된 유리 깔대기 내의 실리카 300 g의 상부에 얻어진 분말을 첨가하고 생성물을 헥산/에틸아세테이트=8:1로 용리시켰다. 생성물을 2-프로판올로부터 결정화하였다. 2-비닐-디벤조푸란을 95% 수율로 분리시켰다.

- [0254] $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3): 7.94 (d, 1H)
- [0255] 7.98 - 7.92 (m, 2H)
- [0256] 7.64 - 7.32 (m, 5H)
- [0257] 6.92 (dxd 1H)
- [0258] 5.82 (d, 1H)
- [0259] 5.30 (d, 1H)

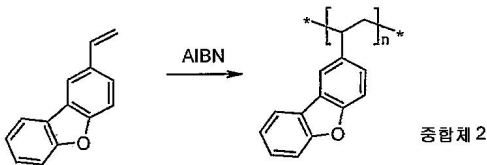
[0260] 실시예 3



[0261]

[0262] 4-비닐-디벤조푸란(실시예 1) 1g 및 상기 반응식에 기재된 개시제 0.01 당량을 0.5 ml 클로로벤젠 중에 용해시키고 탈기시키고 질소 하에 120°C에서 24 시간 동안 교반하였다. 생성물을 MeOH 중에 되풀이 침전에 의해 정제하였다. 수율 70%. GPC: $M_n=13600$, $PDI=1.16$.

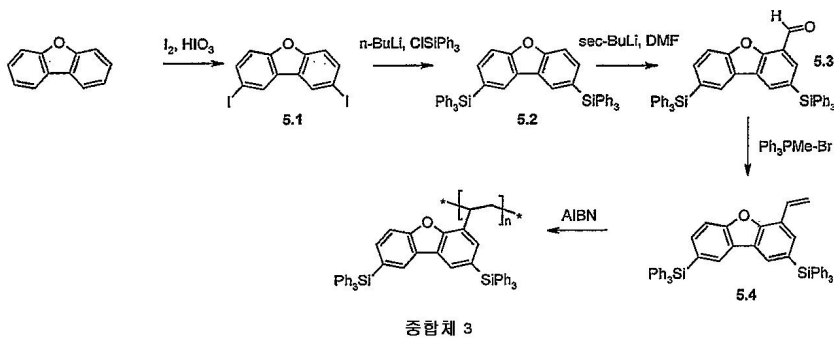
[0263] 실시예 4



[0264]

[0265] 2-비닐-디벤조푸란(실시예 2) 1.24 g 및 AIBN 1.5 중량%를 톨루엔 5 ml 중에 용해시키고 탈기시키고 불활성 분위기 하에 80°C에서 24 시간 동안 중합하였다. 중합체를 메탄올 중에 되풀이 침전에 의해 정제하였다. 수율 83%. GPC: $M_n=19800$, $PDI=1.96$.

[0266] 실시예 5



[0267]

[0268] 벤조푸란 16.8g(90.1 mmol), 요오드 19.7g(80mmol), 요오드산 7.7 g(44 mmol)을 산성 산 200ml, 물 15 ml, 황산 2 ml 및 사염화탄소 10 ml 중에 용해시키고 65°C에서 30 시간 동안 교반하였다. 생성물을 여과시키고 뜨거운 톨루엔 중에 재용해시키고 메탄올을 첨가하여 다시 침전시켰다. 2,8-디요오도디벤조푸란(5.1)을 60.7 % 수율로 분리시켰다.

[0269] $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3): 8.2 (s, 2H)

[0270] 7.74 (d, 2H)

[0271] 7.33 (d, 2H)

[0272] 2,8-디요오도디벤조푸란 4g(13.5 mmol)을 건조 THF 100 ml 중에 용해시켰다. 헥산 중의 1.6 M n-부틸리튬 용액

17.8 ml를 -78℃에서 적가하였다. 1 시간 동안 -78℃에서 교반한 후, THF 20 ml 중의 클로로트리페닐실란 8.8 g(29.84 mmol)의 용액을 첨가하였다. 이 반응 혼합물을 실온으로 가온하고 포화 염화암모늄 용액으로 킨칭하였다. 유기 상을 여과시키고 생성물을 THF로부터 재결정화에 의해 정제하여 2,8-디-(트리페닐실릴)-디벤조푸란 (5.2) 5.62 g(60%)을 얻었다.

[0273] ¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): 8.08 (s, 2H)

[0274] 6.68 - 7.58 (m, 16H)

[0275] 7.49 - 7.36 (m, 18H)

[0276] 2,8-디-(트리페닐실릴)-디벤조푸란 1 g(1.46 mmol)을 45℃에서 건조 THF 100 ml 중에 용해시키고 시클로헥산 중의 1.4 M sec-부틸리튬 용액 10 ml를 첨가하였다. 45℃에서 15 분 동안 교반한 후, 건조 DMF 2 ml를 첨가하였다; 이 반응 혼합물을 1 시간 동안 교반하였다. 0.5 M HCl 100 ml를 첨가하여 반응물을 킨칭하였다. 생성물을 에틸아세테이트로 추출하고 실리카 겔에서 용리제로서 헵탄:에틸아세테이트(3:1)로 칼럼 크로마토그래피로 정제하였다. 2,8-디-(트리페닐실릴)-디벤조푸란-4-카복스알데히드(5.3)를 30.2% 수율로 얻었다.

[0277] ¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): 10.5 (s, 1H)

[0278] 8.30 (s, 1H)

[0279] 8.15 (s, 1H)

[0280] 8.11 (s, 1H)

[0281] 7.73 - 7.55 (m, 14H)

[0282] 7.49 - 7.36 (m, 18H)

[0283] 실시예 2의 방법에 따라 2,8-디-(트리페닐실릴)-디벤조푸란-4-카복스알데히드를 메틸 트리페닐포스포늄 브로마이드와 반응시켜 4-비닐-2,8-디-(트리페닐실릴)-디벤조푸란(5.4)을 37.8% 수율로 얻었다.

[0284] ¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): 7.99 (s, 1H)

[0285] 7.88 (s, 1H)

[0286] 7.57 - 7.48 (m, 15H)

[0287] 7.40 - 7.26 (m, 18H)

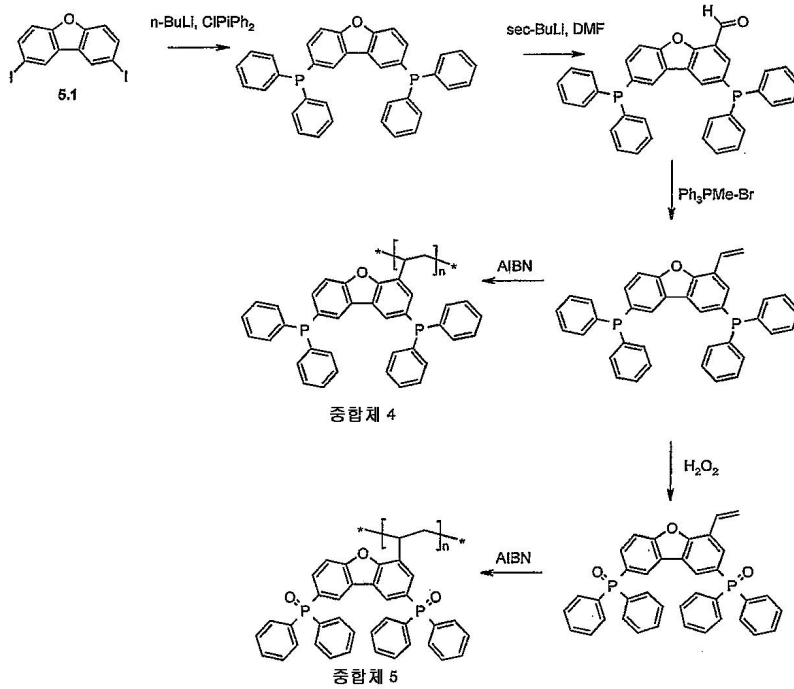
[0288] 6.93(dd, 1H)

[0289] 6.14 (d, 1H)

[0290] 5.46 (d, 1H)

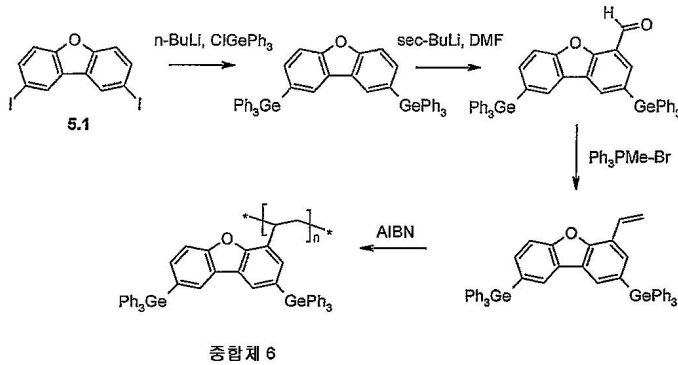
[0291] 실시예 4의 방법에 따라 중합체 3을 30% 수율로 얻었다. GPC: Mn=6400, PDI=1.26.

[0292] 실시예 6: 실시예 5에서의 방법과 유사하게 다음의 반응식에 따라, 중합체 4 및 중합체 5를 얻었다:



[0293]

[0294] 실시예 7: 실시예 5에서의 방법과 유사하게 다음의 반응식에 따라, 중합체 6을 얻었다:



[0295]

[0296] 용도 실시예

[0297] 다음의 방식으로 단일 유기 층을 갖는 유기 발광 디바이스를 제조하였다: 유리 기판에, 스퍼터링 및 이후 패터닝에 의해 80 nm 두께의 ITO 필름을 형성하였다. 산소 플라즈마 처리된 ITO 필름에, PEDOT:PSS(Baytron P)를 사용하여 스프인 코팅하고 200°C(10 분)에서 가열하여 80 nm 두께의 정공 주입 층을 형성하였다. 톨루엔 1.1 ml 중의 본 발명의 중합체 15 mg, TPD 1.25 mg, PBD 7.5 mg 및 Ir(ppy)₃ 1.25 mg의 용액을 스프인 코팅(3100 rpm.; 40 초)에 의해 도포하여 80 nm 두께를 얻었다. 필름을 질소 분위기 하에 80°C에서 30 분 동안 건조시켰다. 진공 증착 챔버 내에 기판을 넣고, 5 nm 바륨 층, 이어서 70 nm 알루미늄 층을 증착하여 2층 구조를 갖는 캐소드를 형성하였다. 조작 및 디바이스 효율의 세부사항은 다음의 표에 기재되어 있다.

화합물	최대 QE [%]	cd/A @ 1000cd/qm	V @ 1000cd/qm	CIE x	CIE y
중합체 1		8.8	12.0	0.3	0.63
중합체 2	3.07	9.8	12.3	0.3	0.63

[0298]

专利名称(译)	用于电致发光器件的二苯并呋喃聚合物		
公开(公告)号	KR1020110011665A	公开(公告)日	2011-02-08
申请号	KR1020107027589	申请日	2009-05-19
[标]申请(专利权)人(译)	巴斯夫欧洲公司		
申请(专利权)人(译)	巴斯夫eseuyi		
当前申请(专利权)人(译)	巴斯夫eseuyi		
[标]发明人	CHEBOTAREVA NATALIA 체보타레바나탈리아 PRETOT ROGER 프레토트로저 VAN DER SCHAAF PAUL ADRIAAN 반데르차프폴아드리안 WOLLEB ANNEMARIE 볼렙안네마리 WOLLEB HEINZ 볼렙하인츠		
发明人	체보타레바나탈리아 프레토트로저 반데르차프폴아드리안 볼렙안네마리 볼렙하인츠		
IPC分类号	C09K11/06 C07D307/91 H05B33/20 C07D307/78		
CPC分类号	C09K11/06 H05B33/20 C07D307/78 C07D307/91 H05B33/14 C09K11/02 C09K2211/145 H01L51/004 H01L51/0073 H01L51/5012		
代理人(译)	Gimjinhoe		
优先权	2008157389 2008-06-02 EP		
其他公开文献	KR101634820B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明公开了基于下列化学式I的重复结构单元的均聚物的电致发光材料： $R^9, R^9\#39;, R^9\prime, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{11}\#39;, R^{13}\#39;, R^{14}\#39;$ 图像存在（特殊参考）该等式可以是独立的，H和Sp是R¹⁰的奇异性： R^9 ，并且 $R^9\#39;, R^9\prime$ ，R中的一个或多个 $R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{11}\#39;, R^{13}\#39;, R^{14}\#39;$ 是化学式它或有机取代基与2的有机取代基是有机间隔基，它是PG $\#39;$ 的奇怪性由可聚合转折点诱导，其为x10⁰或1，取代基和间隔基在权利要求1中定义。本发明公开了用于这种新型聚合物的单体及其制造方法。通常，在进一步包括选自磷光金属络合和荧光掺杂剂的亮度组分的装置中使用均聚物作为主体材料是有利的。

